



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Apr 26, 2016 – 02:12 PM BST

PDB ID : 1DEF
Title : PEPTIDE DEFORMYLASE CATALYTIC CORE (RESIDUES 1-147), NMR,
9 STRUCTURES
Authors : Meinnel, T.; Dardel, F.
Deposited on : 1996-03-19

This is a Full wwPDB NMR Structure Validation Report for a publicly released PDB entry.
We welcome your comments at validation@mail.wwpdb.org
A user guide is available at
<http://wwpdb.org/validation/2016/NMRValidationReportHelp>
with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

The following versions of software and data (see [references ⓘ](#)) were used in the production of this report:

Cyrange : Kirchner and Güntert (2011)
NmrClust : Kelley et al. (1996)
MolProbity : 4.02b-467
Mogul : unknown
Percentile statistics : 20151230.v01 (using entries in the PDB archive December 30th 2015)
RCI : v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV : Wang et al. (2010)
ShiftChecker : rb-20027457
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : rb-20027457

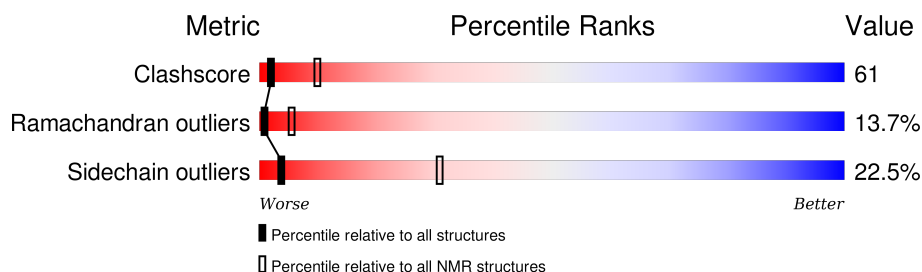
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

The overall completeness of chemical shifts assignment was not calculated.

Percentile scores (ranging between 0-100) for global validation metrics of the entry are shown in the following graphic. The table shows the number of entries on which the scores are based.



Metric	Whole archive (#Entries)	NMR archive (#Entries)
Clashscore	114402	11133
Ramachandran outliers	111179	9975
Sidechain outliers	111093	9958

The table below summarises the geometric issues observed across the polymeric chains and their fit to the experimental data. The red, orange, yellow and green segments indicate the fraction of residues that contain outliers for ≥ 3 , 2, 1 and 0 types of geometric quality criteria. A cyan segment indicates the fraction of residues that are not part of the well-defined cores, and a grey segment represents the fraction of residues that are not modelled. The numeric value for each fraction is indicated below the corresponding segment, with a dot representing fractions $\leq 5\%$

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	147	<div> <div></div> <div>27%</div> <div>33%</div> <div>21%</div> <div>8%</div> <div>11%</div> </div>

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 9 models. Model 8 is the overall representative, medoid model (most similar to other models).

The following residues are included in the computation of the global validation metrics.

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model
1	A:3-A:7, A:12-A:62, A:68-A:142 (131)	0.96	8

Ill-defined regions of proteins are excluded from the global statistics.

Ligands and non-protein polymers are included in the analysis.

The models can be grouped into 3 clusters. No single-model clusters were found.

Cluster number	Models
1	3, 7, 8, 9
2	2, 4, 6
3	1, 5

3 Entry composition

There are 2 unique types of molecules in this entry. The entry contains 2352 atoms, of which 1185 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called PEPTIDE DEFORMYLASE.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	147	Total	C	H	N	O	S	0
			2351	732	1185	201	227	6	

- Molecule 2 is ZINC ION (three-letter code: ZN) (formula: Zn).

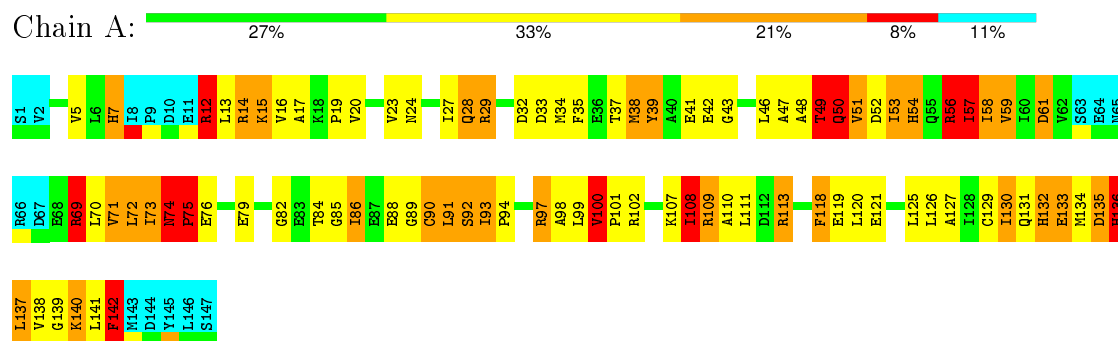
Mol	Chain	Residues	Atoms	
2	A	1	Total	Zn
			1	1

4 Residue-property plots

4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

These plots are provided for all protein, RNA and DNA chains in the entry. The first graphic is the same as shown in the summary in section 1 of this report. The second graphic shows the sequence where residues are colour-coded according to the number of geometric quality criteria for which they contain at least one outlier: green = 0, yellow = 1, orange = 2 and red = 3 or more. Stretches of 2 or more consecutive residues without any outliers are shown as green connectors. Residues which are classified as ill-defined in the NMR ensemble, are shown in cyan with an underline colour-coded according to the previous scheme. Residues which were present in the experimental sample, but not modelled in the final structure are shown in grey.

- Molecule 1: PEPTIDE DEFORMYLASE

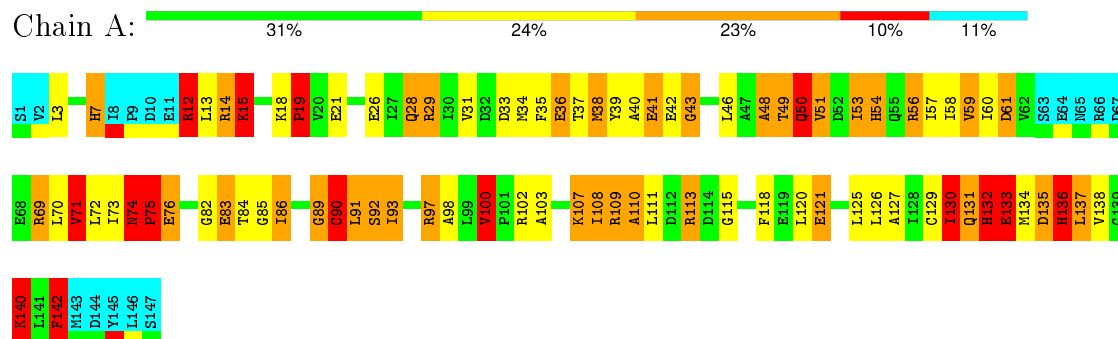


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

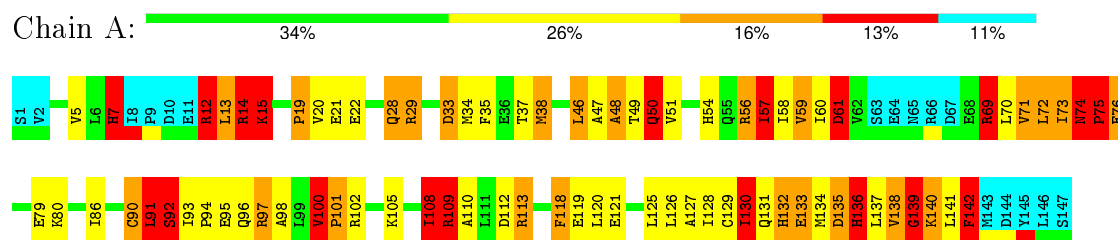
4.2.1 Score per residue for model 1

- Molecule 1: PEPTIDE DEFORMYLASE



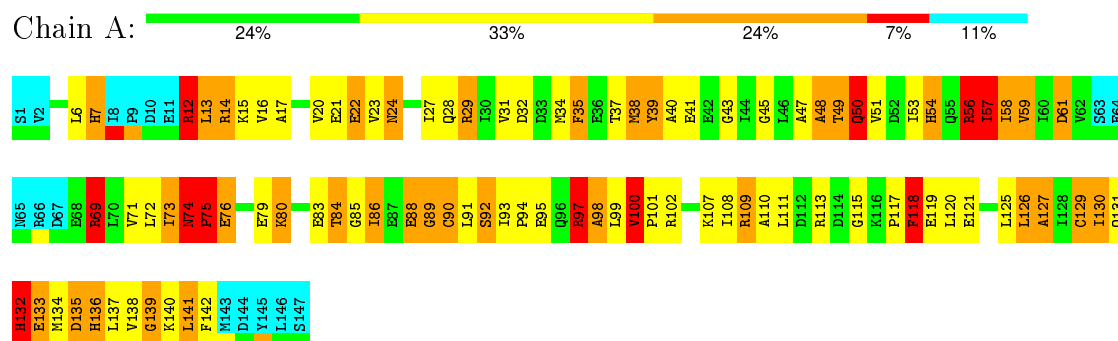
4.2.2 Score per residue for model 2

• Molecule 1: PEPTIDE DEFORMYLASE



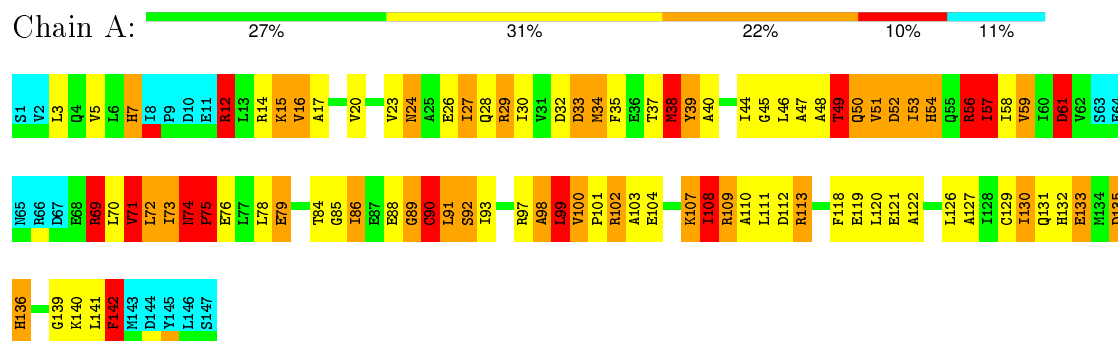
4.2.3 Score per residue for model 3

• Molecule 1: PEPTIDE DEFORMYLASE



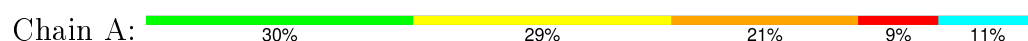
4.2.4 Score per residue for model 4

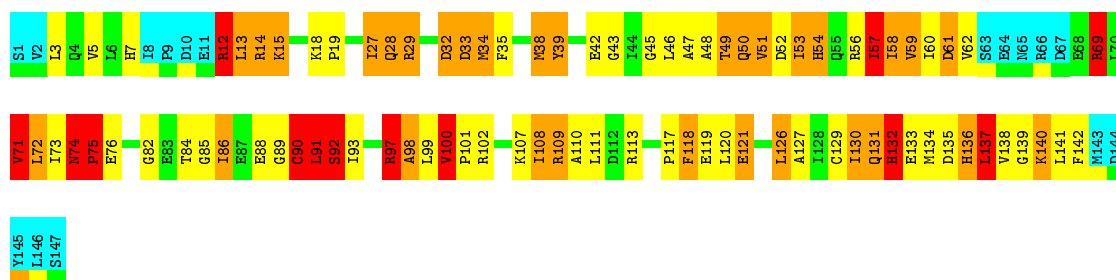
• Molecule 1: PEPTIDE DEFORMYLASE



4.2.5 Score per residue for model 5

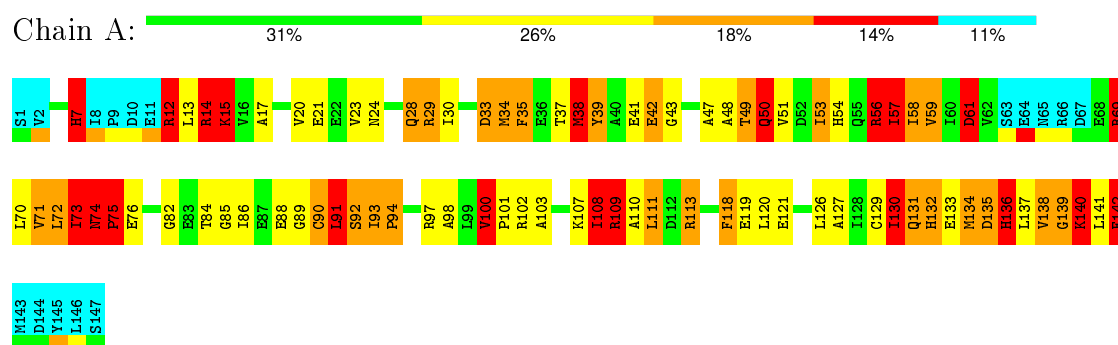
• Molecule 1: PEPTIDE DEFORMYLASE





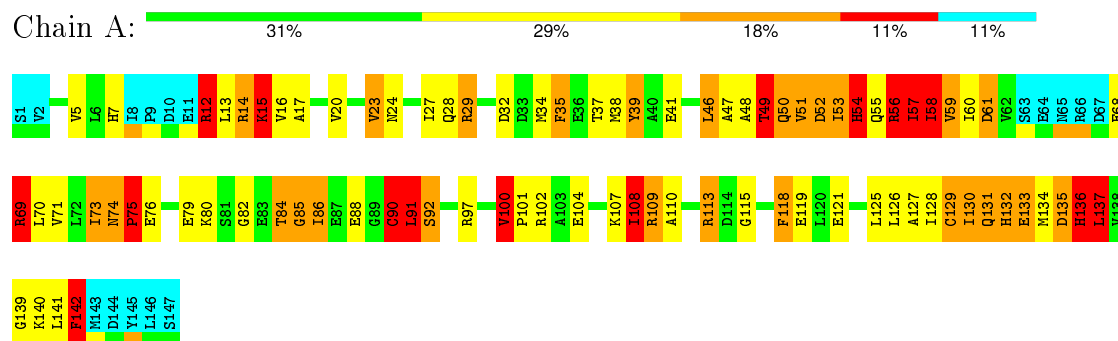
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: PEPTIDE DEFORMYLASE



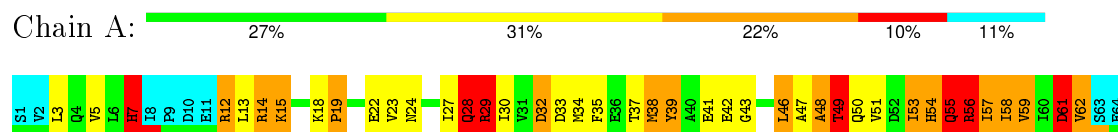
4.2.7 Score per residue for model 7

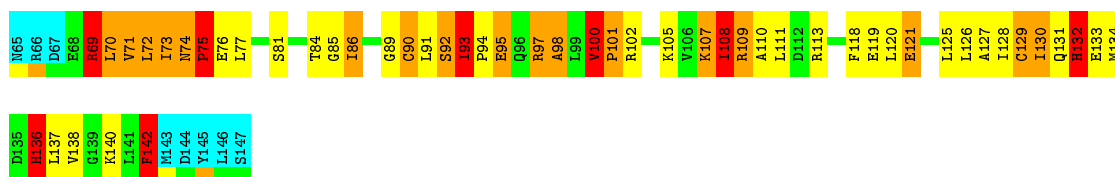
- Molecule 1: PEPTIDE DEFORMYLASE



4.2.8 Score per residue for model 8 (medoid)

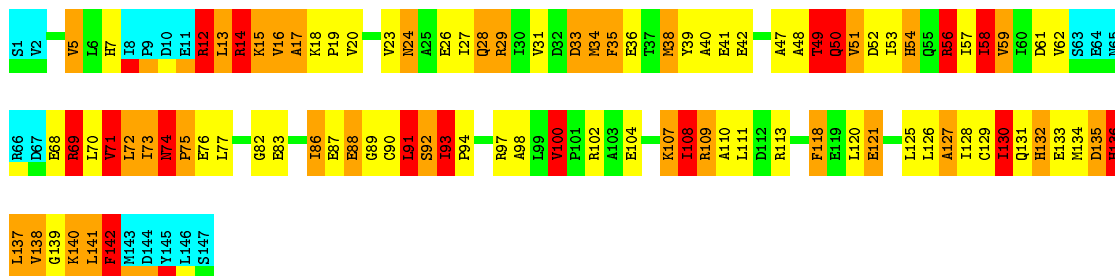
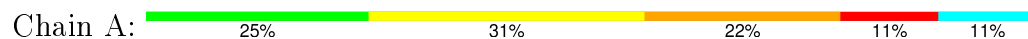
- Molecule 1: PEPTIDE DEFORMYLASE





4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: PEPTIDE DEFORMYLASE



5 Refinement protocol and experimental data overview ⓘ

Of the ? calculated structures, 9 were deposited, based on the following criterion: ?.

The following table shows the software used for structure solution, optimisation and refinement.

Software name	Classification	Version
X-PLOR	refinement	

No chemical shift data was provided. No validations of the models with respect to experimental NMR restraints is performed at this time.

6 Model quality i

6.1 Standard geometry i

Bond lengths and bond angles in the following residue types are not validated in this section: ZN

The Z score for a bond length (or angle) is the number of standard deviations the observed value is removed from the expected value. A bond length (or angle) with $|Z| > 5$ is considered an outlier worth inspection. RMSZ is the (average) root-mean-square of all Z scores of the bond lengths (or angles).

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	#Z>5	RMSZ	#Z>5
1	A	1.18±0.01	0±0/1049 (0.0±0.0%)	2.07±0.05	39±5/1416 (2.7±0.3%)
All	All	1.18	0/9441 (0.0%)	2.07	347/12744 (2.7%)

Chiral center outliers are detected by calculating the chiral volume of a chiral center and verifying if the center is modelled as a planar moiety or with the opposite hand. A planarity outlier is detected by checking planarity of atoms in a peptide group, atoms in a mainchain group or atoms of a sidechain that are expected to be planar.

Mol	Chain	Chirality	Planarity
1	A	0.0±0.0	10.0±0.9
All	All	0	90

There are no bond-length outliers.

All unique angle outliers are listed below. They are sorted according to the Z-score of the worst occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	136	HIS	CA-CB-CG	19.39	146.56	113.60	3	9
1	A	51	VAL	CA-CB-CG2	-13.06	91.31	110.90	5	8
1	A	132	HIS	CA-CB-CG	12.76	135.29	113.60	5	6
1	A	142	PHE	CB-CG-CD2	-12.29	112.20	120.80	8	4
1	A	39	TYR	CB-CG-CD2	-11.77	113.94	121.00	5	4
1	A	142	PHE	CB-CG-CD1	11.20	128.64	120.80	8	4
1	A	76	GLU	N-CA-C	-10.84	81.75	111.00	5	9
1	A	35	PHE	CB-CG-CD1	-10.77	113.26	120.80	7	3
1	A	100	VAL	CG1-CB-CG2	-10.71	93.77	110.90	7	9
1	A	100	VAL	CA-CB-CG2	10.41	126.52	110.90	3	4
1	A	35	PHE	CB-CG-CD2	10.41	128.09	120.80	7	3
1	A	39	TYR	CB-CG-CD1	10.25	127.15	121.00	5	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	7	HIS	CA-CB-CG	-10.25	96.18	113.60	6	4
1	A	54	HIS	CA-CB-CG	-9.88	96.80	113.60	2	5
1	A	109	ARG	N-CA-C	-9.87	84.35	111.00	1	9
1	A	12	ARG	CA-C-N	-9.78	95.68	117.20	6	1
1	A	62	VAL	CA-C-N	-9.52	96.25	117.20	8	1
1	A	142	PHE	N-CA-CB	-9.14	94.14	110.60	8	1
1	A	62	VAL	N-CA-C	-8.93	86.90	111.00	8	1
1	A	132	HIS	CB-CA-C	-8.66	93.07	110.40	6	3
1	A	69	ARG	CA-C-N	-8.60	98.29	117.20	9	2
1	A	118	PHE	CA-CB-CG	8.47	134.23	113.90	3	5
1	A	71	VAL	N-CA-CB	-8.31	93.23	111.50	9	9
1	A	100	VAL	CA-CB-CG1	-7.96	98.96	110.90	7	1
1	A	59	VAL	CG1-CB-CG2	7.84	123.45	110.90	4	7
1	A	136	HIS	N-CA-C	-7.75	90.07	111.00	1	5
1	A	85	GLY	N-CA-C	-7.66	93.95	113.10	4	1
1	A	91	LEU	C-N-CA	7.60	140.70	121.70	2	1
1	A	15	LYS	N-CA-C	7.58	131.46	111.00	7	3
1	A	90	CYS	N-CA-CB	-7.53	97.05	110.60	4	6
1	A	76	GLU	N-CA-CB	-7.49	97.11	110.60	1	4
1	A	49	THR	CA-C-N	-7.42	100.89	117.20	4	3
1	A	59	VAL	N-CA-C	7.38	130.92	111.00	3	3
1	A	132	HIS	CA-C-N	-7.24	101.27	117.20	2	3
1	A	141	LEU	N-CA-CB	-7.23	95.94	110.40	9	1
1	A	139	GLY	N-CA-C	-7.21	95.09	113.10	2	3
1	A	98	ALA	CB-CA-C	-7.17	99.35	110.10	4	1
1	A	142	PHE	CA-CB-CG	-7.16	96.72	113.90	2	3
1	A	132	HIS	N-CA-C	-7.07	91.91	111.00	2	3
1	A	46	LEU	CA-C-N	-7.00	101.81	117.20	2	1
1	A	84	THR	N-CA-C	6.91	129.65	111.00	7	1
1	A	50	GLN	CB-CG-CD	6.90	129.54	111.60	1	1
1	A	137	LEU	CB-CG-CD2	-6.82	99.40	111.00	7	1
1	A	12	ARG	O-C-N	6.82	133.61	122.70	6	1
1	A	53	ILE	N-CA-C	-6.76	92.75	111.00	5	4
1	A	7	HIS	CA-C-N	-6.75	102.34	117.20	2	4
1	A	140	LYS	CA-C-N	-6.70	102.46	117.20	9	2
1	A	130	ILE	CA-CB-CG2	-6.68	97.54	110.90	6	7
1	A	62	VAL	O-C-N	6.65	133.34	122.70	8	1
1	A	49	THR	CA-CB-CG2	-6.61	103.14	112.40	8	1
1	A	84	THR	OG1-CB-CG2	-6.52	95.00	110.00	3	1
1	A	49	THR	N-CA-C	6.47	128.48	111.00	9	2
1	A	38	MET	CA-CB-CG	-6.47	102.30	113.30	4	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	89	GLY	N-CA-C	-6.47	96.92	113.10	4	2
1	A	51	VAL	CG1-CB-CG2	-6.47	100.56	110.90	7	2
1	A	62	VAL	CA-CB-CG2	-6.44	101.24	110.90	8	1
1	A	16	VAL	CA-C-N	-6.44	103.03	117.20	3	1
1	A	58	ILE	CA-CB-CG2	6.43	123.77	110.90	5	2
1	A	118	PHE	CB-CG-CD2	-6.43	116.30	120.80	9	2
1	A	75	PRO	CA-C-N	-6.42	103.08	117.20	5	5
1	A	34	MET	N-CA-C	-6.41	93.69	111.00	5	4
1	A	69	ARG	CA-CB-CG	6.35	127.36	113.40	9	1
1	A	12	ARG	N-CA-CB	-6.34	99.18	110.60	5	1
1	A	69	ARG	N-CA-CB	-6.34	99.18	110.60	6	2
1	A	88	GLU	N-CA-C	6.33	128.09	111.00	9	1
1	A	108	ILE	CA-CB-CG1	-6.30	99.02	111.00	4	2
1	A	91	LEU	N-CA-C	6.28	127.97	111.00	2	2
1	A	108	ILE	CA-C-N	-6.27	103.41	117.20	8	5
1	A	61	ASP	CB-CG-OD2	-6.21	112.71	118.30	6	5
1	A	57	ILE	CA-CB-CG2	-6.21	98.48	110.90	4	4
1	A	76	GLU	CB-CA-C	6.17	122.75	110.40	1	4
1	A	49	THR	C-N-CA	6.16	137.09	121.70	9	2
1	A	135	ASP	N-CA-C	-6.13	94.44	111.00	4	1
1	A	98	ALA	CA-C-N	-6.07	103.85	117.20	4	1
1	A	99	LEU	N-CA-C	-6.06	94.63	111.00	4	1
1	A	69	ARG	O-C-N	6.02	132.33	122.70	9	1
1	A	140	LYS	N-CA-C	-5.98	94.85	111.00	9	2
1	A	62	VAL	CB-CA-C	5.98	122.77	111.40	8	1
1	A	15	LYS	CB-CA-C	-5.97	98.46	110.40	2	2
1	A	84	THR	CA-C-N	-5.96	104.27	116.20	7	1
1	A	46	LEU	N-CA-C	-5.96	94.92	111.00	7	1
1	A	15	LYS	N-CA-CB	-5.92	99.94	110.60	7	1
1	A	98	ALA	N-CA-CB	5.92	118.38	110.10	4	1
1	A	95	GLU	N-CA-C	-5.92	95.03	111.00	2	1
1	A	71	VAL	CB-CA-C	5.91	122.62	111.40	9	7
1	A	90	CYS	N-CA-C	5.90	126.93	111.00	5	1
1	A	34	MET	CA-CB-CG	-5.88	103.30	113.30	4	1
1	A	53	ILE	CA-CB-CG2	-5.85	99.21	110.90	4	3
1	A	132	HIS	O-C-N	5.84	132.05	122.70	6	4
1	A	90	CYS	CA-CB-SG	5.84	124.51	114.00	3	1
1	A	139	GLY	C-N-CA	-5.83	107.13	121.70	7	1
1	A	110	ALA	N-CA-CB	-5.76	102.03	110.10	1	1
1	A	50	GLN	N-CA-C	5.75	126.53	111.00	1	3
1	A	54	HIS	N-CA-C	5.74	126.49	111.00	1	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	48	ALA	N-CA-C	-5.73	95.52	111.00	4	1
1	A	129	CYS	CA-CB-SG	5.73	124.31	114.00	8	2
1	A	55	GLN	CA-CB-CG	-5.69	100.87	113.40	8	1
1	A	141	LEU	N-CA-C	5.69	126.36	111.00	3	1
1	A	91	LEU	CA-C-N	-5.67	104.71	117.20	9	1
1	A	136	HIS	CB-CA-C	-5.66	99.09	110.40	5	1
1	A	92	SER	N-CA-CB	-5.65	102.03	110.50	5	3
1	A	127	ALA	N-CA-C	-5.60	95.87	111.00	9	2
1	A	90	CYS	CA-C-N	-5.56	104.97	117.20	6	1
1	A	133	GLU	CA-CB-CG	5.55	125.62	113.40	1	1
1	A	108	ILE	O-C-N	5.53	131.56	122.70	6	4
1	A	71	VAL	CA-CB-CG1	-5.53	102.61	110.90	6	4
1	A	51	VAL	N-CA-C	-5.52	96.10	111.00	6	1
1	A	49	THR	O-C-N	5.50	131.49	122.70	4	1
1	A	102	ARG	NE-CZ-NH2	-5.46	117.57	120.30	1	1
1	A	133	GLU	OE1-CD-OE2	5.45	129.83	123.30	3	1
1	A	57	ILE	N-CA-C	-5.43	96.33	111.00	9	1
1	A	92	SER	CA-C-N	-5.42	105.27	117.20	4	1
1	A	73	ILE	N-CA-CB	-5.42	98.34	110.80	6	1
1	A	122	ALA	N-CA-CB	5.40	117.66	110.10	4	1
1	A	107	LYS	CA-C-N	-5.39	105.34	117.20	8	6
1	A	136	HIS	N-CA-CB	5.38	120.28	110.60	3	1
1	A	115	GLY	N-CA-C	-5.38	99.66	113.10	7	3
1	A	62	VAL	N-CA-CB	-5.37	99.69	111.50	8	1
1	A	50	GLN	CB-CA-C	-5.33	99.73	110.40	2	1
1	A	131	GLN	N-CA-C	-5.31	96.67	111.00	1	2
1	A	54	HIS	CA-C-N	-5.30	105.53	117.20	9	2
1	A	136	HIS	CB-CG-ND1	-5.30	109.94	123.20	8	1
1	A	98	ALA	O-C-N	5.29	131.17	122.70	4	1
1	A	118	PHE	CB-CG-CD1	-5.29	117.10	120.80	6	2
1	A	133	GLU	N-CA-CB	-5.26	101.13	110.60	4	1
1	A	58	ILE	N-CA-C	-5.26	96.81	111.00	7	1
1	A	96	GLN	CA-C-N	-5.25	105.64	117.20	2	1
1	A	50	GLN	CA-CB-CG	-5.24	101.88	113.40	3	1
1	A	89	GLY	CA-C-N	-5.19	105.78	117.20	4	1
1	A	60	ILE	N-CA-C	-5.19	96.99	111.00	5	1
1	A	59	VAL	N-CA-CB	-5.17	100.12	111.50	9	1
1	A	137	LEU	N-CA-C	5.17	124.96	111.00	5	1
1	A	35	PHE	N-CA-C	-5.16	97.07	111.00	7	2
1	A	132	HIS	N-CA-CB	5.15	119.86	110.60	6	1
1	A	48	ALA	CB-CA-C	5.14	117.81	110.10	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	61	ASP	CB-CG-OD1	-5.14	113.68	118.30	1	1
1	A	70	LEU	N-CA-C	5.13	124.84	111.00	7	1
1	A	142	PHE	CB-CA-C	5.09	120.57	110.40	8	1
1	A	138	VAL	C-N-CA	-5.09	111.62	122.30	9	1
1	A	129	CYS	CB-CA-C	-5.07	100.27	110.40	3	1
1	A	118	PHE	N-CA-C	5.04	124.62	111.00	5	1
1	A	51	VAL	CA-CB-CG1	-5.04	103.34	110.90	9	1
1	A	12	ARG	CA-C-O	5.03	130.66	120.10	6	1
1	A	16	VAL	O-C-N	5.03	130.74	122.70	3	1
1	A	92	SER	O-C-N	5.01	130.72	122.70	4	1
1	A	84	THR	N-CA-CB	-5.00	100.79	110.30	7	1
1	A	132	HIS	CB-CG-ND1	5.00	135.70	123.20	2	1

There are no chirality outliers.

All unique planar outliers are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Group	Models (Total)
1	A	14	ARG	Sidechain	9
1	A	56	ARG	Sidechain	9
1	A	113	ARG	Sidechain	9
1	A	109	ARG	Sidechain	9
1	A	69	ARG	Sidechain	9
1	A	29	ARG	Sidechain	9
1	A	97	ARG	Sidechain	9
1	A	12	ARG	Sidechain	9
1	A	102	ARG	Sidechain	8
1	A	74	ASN	Peptide	7
1	A	18	LYS	Peptide	1
1	A	93	ILE	Peptide	1
1	A	100	VAL	Peptide	1

6.2 Too-close contacts ⓘ

In the following table, the Non-H and H(model) columns list the number of non-hydrogen atoms and hydrogen atoms in each chain respectively. The H(added) column lists the number of hydrogen atoms added and optimized by MolProbity. The Clashes column lists the number of clashes averaged over the ensemble.

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	1036	1069	1069	129±12
All	All	9333	9621	9621	1165

The all-atom clashscore is defined as the number of clashes found per 1000 atoms (including hydrogen atoms). The all-atom clashscore for this structure is 61.

All unique clashes are listed below, sorted by their clash magnitude.

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:35:PHE:CE2	1:A:69:ARG:HB2	0.95	1.95	7	2
1:A:100:VAL:CG2	1:A:136:HIS:HB3	0.92	1.95	3	1
1:A:132:HIS:CD2	1:A:136:HIS:CE1	0.91	2.57	8	7
1:A:132:HIS:CD2	1:A:136:HIS:CD2	0.91	2.58	7	3
1:A:133:GLU:O	1:A:136:HIS:HB2	0.90	1.66	4	5
1:A:129:CYS:O	1:A:132:HIS:HB3	0.87	1.68	2	6
1:A:90:CYS:SG	1:A:136:HIS:CE1	0.87	2.66	2	1
1:A:15:LYS:CB	1:A:50:GLN:HA	0.85	2.02	9	2
1:A:7:HIS:HB2	1:A:92:SER:CB	0.84	2.02	9	1
1:A:7:HIS:HB2	1:A:92:SER:CA	0.83	2.03	9	1
1:A:90:CYS:CB	1:A:136:HIS:CE1	0.82	2.63	5	4
1:A:132:HIS:CD2	1:A:136:HIS:NE2	0.82	2.48	6	4
1:A:100:VAL:HG21	1:A:141:LEU:HA	0.81	1.50	4	1
1:A:90:CYS:HB2	1:A:136:HIS:CD2	0.81	2.10	2	2
1:A:100:VAL:HG23	1:A:136:HIS:HB3	0.80	1.50	3	1
1:A:90:CYS:HB2	1:A:136:HIS:CE1	0.80	2.10	3	3
1:A:7:HIS:CE1	1:A:50:GLN:HB2	0.80	2.11	4	2
1:A:7:HIS:CD2	1:A:92:SER:HB3	0.80	2.11	5	2
1:A:129:CYS:C	1:A:132:HIS:HB3	0.79	1.98	5	4
1:A:7:HIS:HB2	1:A:92:SER:HA	0.79	1.53	9	1
1:A:15:LYS:HB2	1:A:50:GLN:CG	0.78	2.07	1	2
1:A:7:HIS:CE1	1:A:50:GLN:NE2	0.78	2.51	2	3
1:A:100:VAL:HG11	1:A:141:LEU:HB3	0.75	1.57	9	1
1:A:73:ILE:HG13	1:A:110:ALA:HB1	0.75	1.58	1	2
1:A:35:PHE:CD1	1:A:39:TYR:CZ	0.75	2.75	8	1
1:A:35:PHE:CE2	1:A:69:ARG:CB	0.75	2.69	7	1
1:A:35:PHE:CE1	1:A:59:VAL:HB	0.74	2.18	1	9
1:A:38:MET:SD	1:A:126:LEU:HB3	0.73	2.23	9	3
1:A:7:HIS:CD2	1:A:92:SER:CB	0.73	2.71	3	3
1:A:86:ILE:CD1	1:A:132:HIS:CD2	0.73	2.72	7	3
1:A:15:LYS:HB2	1:A:50:GLN:HA	0.73	1.61	9	2
1:A:7:HIS:CD2	1:A:12:ARG:HB2	0.72	2.19	3	1
1:A:90:CYS:CB	1:A:136:HIS:CD2	0.71	2.72	4	4
1:A:86:ILE:CD1	1:A:132:HIS:CG	0.71	2.73	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:100:VAL:HG12	1:A:140:LYS:CB	0.71	2.16	5	2
1:A:142:PHE:CD1	1:A:142:PHE:N	0.70	2.59	4	1
1:A:90:CYS:SG	1:A:98:ALA:HB3	0.69	2.27	6	2
1:A:35:PHE:CE1	1:A:69:ARG:HB2	0.69	2.21	2	1
1:A:7:HIS:CG	1:A:92:SER:HB3	0.69	2.22	3	3
1:A:35:PHE:CE1	1:A:69:ARG:HG3	0.69	2.23	6	2
1:A:15:LYS:HB3	1:A:54:HIS:CE1	0.69	2.22	4	1
1:A:48:ALA:O	1:A:49:THR:HB	0.68	1.87	9	4
1:A:35:PHE:CD1	1:A:59:VAL:HG21	0.68	2.23	8	4
1:A:129:CYS:HA	1:A:132:HIS:HB2	0.67	1.63	2	1
1:A:12:ARG:HB3	1:A:15:LYS:CG	0.67	2.20	5	2
1:A:133:GLU:HA	1:A:136:HIS:CE1	0.67	2.25	3	3
1:A:7:HIS:CD2	1:A:51:VAL:HG12	0.67	2.25	7	1
1:A:133:GLU:HA	1:A:136:HIS:ND1	0.66	2.06	5	7
1:A:86:ILE:HD11	1:A:132:HIS:CD2	0.66	2.25	9	3
1:A:7:HIS:CE1	1:A:92:SER:OG	0.66	2.48	2	1
1:A:7:HIS:CB	1:A:92:SER:HA	0.66	2.21	9	2
1:A:7:HIS:CD2	1:A:50:GLN:NE2	0.66	2.63	2	1
1:A:15:LYS:HE3	1:A:54:HIS:NE2	0.66	2.06	7	1
1:A:7:HIS:HB2	1:A:92:SER:HB3	0.66	1.67	9	1
1:A:100:VAL:HG11	1:A:140:LYS:HA	0.65	1.69	7	1
1:A:133:GLU:HG3	1:A:134:MET:N	0.65	2.07	2	1
1:A:15:LYS:HG2	1:A:50:GLN:H	0.65	1.50	9	1
1:A:88:GLU:CA	1:A:98:ALA:H	0.65	2.04	9	1
1:A:100:VAL:HG11	1:A:140:LYS:CA	0.65	2.22	7	1
1:A:7:HIS:CG	1:A:92:SER:CB	0.65	2.80	8	3
1:A:100:VAL:HG21	1:A:142:PHE:N	0.64	2.07	9	1
1:A:73:ILE:HD12	1:A:118:PHE:CZ	0.64	2.28	9	2
1:A:18:LYS:HB2	1:A:54:HIS:CD2	0.64	2.28	8	1
1:A:100:VAL:CG1	1:A:140:LYS:HB2	0.64	2.22	5	2
1:A:7:HIS:CD2	1:A:50:GLN:HE21	0.64	2.11	2	1
1:A:132:HIS:HD2	1:A:136:HIS:CE1	0.63	2.11	2	4
1:A:132:HIS:O	1:A:135:ASP:N	0.63	2.31	9	3
1:A:7:HIS:CD2	1:A:12:ARG:CB	0.63	2.82	3	1
1:A:15:LYS:HG3	1:A:54:HIS:NE2	0.63	2.07	7	1
1:A:15:LYS:HG3	1:A:54:HIS:CE1	0.63	2.29	7	1
1:A:54:HIS:CD2	1:A:54:HIS:N	0.63	2.64	7	2
1:A:38:MET:SD	1:A:130:ILE:HD11	0.63	2.33	6	3
1:A:47:ALA:HA	1:A:133:GLU:HB3	0.63	1.68	6	6
1:A:7:HIS:CE1	1:A:50:GLN:CB	0.63	2.82	1	3
1:A:86:ILE:HD13	1:A:132:HIS:CG	0.63	2.29	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:88:GLU:HB3	1:A:98:ALA:N	0.63	2.09	9	1
1:A:129:CYS:CA	1:A:132:HIS:HB3	0.62	2.24	5	2
1:A:7:HIS:CE1	1:A:50:GLN:HE21	0.62	2.12	1	1
1:A:74:ASN:H	1:A:74:ASN:HD22	0.62	1.38	1	2
1:A:12:ARG:CB	1:A:15:LYS:HG3	0.62	2.25	4	4
1:A:7:HIS:NE2	1:A:51:VAL:HG12	0.62	2.08	7	1
1:A:34:MET:HB3	1:A:59:VAL:HG22	0.62	1.70	3	6
1:A:7:HIS:CB	1:A:92:SER:CB	0.62	2.77	9	1
1:A:88:GLU:CB	1:A:98:ALA:N	0.62	2.63	9	1
1:A:38:MET:SD	1:A:126:LEU:HD13	0.62	2.35	4	2
1:A:57:ILE:HG23	1:A:73:ILE:CD1	0.62	2.24	1	2
1:A:58:ILE:HG23	1:A:59:VAL:N	0.62	2.10	3	1
1:A:15:LYS:HE3	1:A:50:GLN:CG	0.62	2.24	4	1
1:A:129:CYS:O	1:A:133:GLU:HG3	0.62	1.94	8	3
1:A:58:ILE:CG2	1:A:59:VAL:H	0.61	2.07	9	3
1:A:7:HIS:CE1	1:A:50:GLN:HB3	0.61	2.31	1	1
1:A:38:MET:SD	1:A:130:ILE:CG2	0.61	2.89	5	1
1:A:7:HIS:ND1	1:A:50:GLN:HB2	0.60	2.12	9	1
1:A:129:CYS:HA	1:A:132:HIS:CB	0.60	2.26	5	2
1:A:12:ARG:HG2	1:A:13:LEU:N	0.60	2.10	1	1
1:A:132:HIS:O	1:A:136:HIS:N	0.60	2.34	7	4
1:A:90:CYS:SG	1:A:142:PHE:CE1	0.60	2.94	7	2
1:A:69:ARG:HA	1:A:69:ARG:NH2	0.60	2.12	5	1
1:A:7:HIS:NE2	1:A:50:GLN:NE2	0.60	2.50	2	1
1:A:125:LEU:O	1:A:129:CYS:SG	0.60	2.60	7	5
1:A:100:VAL:HG22	1:A:142:PHE:CD2	0.60	2.32	8	2
1:A:86:ILE:HD11	1:A:136:HIS:CD2	0.60	2.32	5	3
1:A:100:VAL:CG2	1:A:142:PHE:N	0.60	2.65	9	1
1:A:86:ILE:HD11	1:A:132:HIS:NE2	0.60	2.11	9	1
1:A:69:ARG:HH21	1:A:69:ARG:HA	0.60	1.57	5	1
1:A:100:VAL:CG2	1:A:142:PHE:CD2	0.60	2.85	1	2
1:A:49:THR:HG22	1:A:49:THR:O	0.60	1.97	7	1
1:A:73:ILE:HG21	1:A:110:ALA:CB	0.59	2.27	6	4
1:A:86:ILE:HB	1:A:132:HIS:CE1	0.59	2.32	4	1
1:A:101:PRO:CD	1:A:132:HIS:ND1	0.59	2.65	7	2
1:A:15:LYS:HB2	1:A:50:GLN:HG3	0.59	1.73	1	2
1:A:71:VAL:HG12	1:A:118:PHE:CZ	0.59	2.33	1	2
1:A:38:MET:SD	1:A:126:LEU:HD22	0.59	2.36	8	3
1:A:73:ILE:CG1	1:A:110:ALA:HB1	0.59	2.26	1	2
1:A:90:CYS:HB2	1:A:136:HIS:NE2	0.59	2.11	1	2
1:A:100:VAL:HG12	1:A:141:LEU:H	0.59	1.55	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:15:LYS:HG2	1:A:50:GLN:N	0.59	2.12	9	1
1:A:72:LEU:O	1:A:73:ILE:HD13	0.59	1.98	1	2
1:A:7:HIS:CG	1:A:92:SER:HA	0.59	2.32	9	2
1:A:73:ILE:HG13	1:A:110:ALA:CB	0.59	2.27	1	2
1:A:15:LYS:CE	1:A:54:HIS:NE2	0.59	2.66	7	1
1:A:5:VAL:HB	1:A:51:VAL:HG23	0.59	1.75	7	1
1:A:48:ALA:N	1:A:133:GLU:HG2	0.59	2.12	2	1
1:A:141:LEU:HB2	1:A:142:PHE:CZ	0.59	2.33	4	1
1:A:61:ASP:HB3	1:A:69:ARG:HB3	0.59	1.73	7	1
1:A:91:LEU:CD2	1:A:92:SER:H	0.58	2.11	7	1
1:A:49:THR:N	1:A:137:LEU:HD23	0.58	2.14	7	1
1:A:100:VAL:HG11	1:A:141:LEU:CB	0.58	2.29	9	1
1:A:88:GLU:CB	1:A:98:ALA:H	0.58	2.10	9	1
1:A:88:GLU:N	1:A:98:ALA:O	0.58	2.36	9	1
1:A:47:ALA:CB	1:A:133:GLU:HB2	0.58	2.29	2	1
1:A:91:LEU:CD1	1:A:137:LEU:HB2	0.58	2.28	3	1
1:A:93:ILE:N	1:A:94:PRO:CD	0.58	2.67	6	2
1:A:75:PRO:HG3	1:A:108:ILE:HB	0.58	1.75	1	2
1:A:47:ALA:HB1	1:A:137:LEU:HD21	0.58	1.75	7	1
1:A:38:MET:SD	1:A:130:ILE:HG21	0.58	2.38	5	1
1:A:100:VAL:CG1	1:A:141:LEU:HB3	0.58	2.27	9	1
1:A:35:PHE:CD1	1:A:39:TYR:CE1	0.58	2.92	8	1
1:A:12:ARG:CG	1:A:15:LYS:HG3	0.58	2.29	5	1
1:A:132:HIS:CD2	1:A:136:HIS:CG	0.58	2.92	9	2
1:A:141:LEU:HB2	1:A:142:PHE:CE1	0.58	2.34	4	1
1:A:15:LYS:HB3	1:A:50:GLN:CG	0.58	2.28	6	1
1:A:133:GLU:O	1:A:137:LEU:HD13	0.57	1.99	6	1
1:A:73:ILE:HG13	1:A:74:ASN:N	0.57	2.14	8	2
1:A:35:PHE:CE1	1:A:69:ARG:CB	0.57	2.87	2	2
1:A:100:VAL:CG2	1:A:142:PHE:H	0.57	2.12	4	1
1:A:86:ILE:HD13	1:A:132:HIS:CD2	0.57	2.34	7	1
1:A:34:MET:SD	1:A:130:ILE:CD1	0.57	2.93	4	2
1:A:39:TYR:CE1	1:A:61:ASP:HB3	0.57	2.35	8	1
1:A:56:ARG:NH2	1:A:134:MET:SD	0.57	2.78	1	1
1:A:35:PHE:CE1	1:A:61:ASP:OD1	0.57	2.58	1	2
1:A:29:ARG:O	1:A:33:ASP:HB2	0.56	2.00	4	6
1:A:58:ILE:HG13	1:A:59:VAL:N	0.56	2.15	6	2
1:A:86:ILE:HG12	1:A:87:GLU:N	0.56	2.15	9	1
1:A:86:ILE:HG12	1:A:132:HIS:CG	0.56	2.35	2	2
1:A:98:ALA:HB2	1:A:142:PHE:CZ	0.56	2.35	2	1
1:A:38:MET:HG2	1:A:130:ILE:HD11	0.56	1.76	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:12:ARG:CD	1:A:54:HIS:ND1	0.56	2.68	8	1
1:A:100:VAL:HG12	1:A:141:LEU:N	0.56	2.15	3	2
1:A:69:ARG:N	1:A:69:ARG:CD	0.56	2.69	3	2
1:A:86:ILE:HG13	1:A:101:PRO:CG	0.56	2.30	2	1
1:A:69:ARG:CD	1:A:69:ARG:N	0.56	2.67	5	1
1:A:91:LEU:HA	1:A:94:PRO:HD3	0.56	1.77	6	1
1:A:15:LYS:HB2	1:A:50:GLN:HG2	0.56	1.75	1	1
1:A:55:GLN:HG2	1:A:56:ARG:N	0.55	2.17	7	1
1:A:6:LEU:HA	1:A:92:SER:HA	0.55	1.78	3	1
1:A:88:GLU:HB3	1:A:136:HIS:NE2	0.55	2.17	6	1
1:A:108:ILE:HG12	1:A:120:LEU:H	0.55	1.61	1	4
1:A:90:CYS:SG	1:A:100:VAL:HG23	0.55	2.41	6	1
1:A:48:ALA:N	1:A:133:GLU:HB3	0.55	2.16	1	2
1:A:51:VAL:CG2	1:A:52:ASP:N	0.55	2.70	9	2
1:A:88:GLU:CA	1:A:98:ALA:O	0.55	2.54	9	1
1:A:47:ALA:HA	1:A:133:GLU:HB2	0.55	1.78	2	1
1:A:58:ILE:HG22	1:A:59:VAL:H	0.55	1.60	9	5
1:A:15:LYS:CB	1:A:54:HIS:CE1	0.55	2.89	4	1
1:A:74:ASN:N	1:A:75:PRO:HD3	0.55	2.16	6	4
1:A:35:PHE:CD1	1:A:59:VAL:CG2	0.55	2.90	8	1
1:A:27:ILE:HG22	1:A:28:GLN:N	0.55	2.16	4	1
1:A:7:HIS:CD2	1:A:92:SER:OG	0.55	2.59	1	2
1:A:86:ILE:N	1:A:86:ILE:HD13	0.55	2.17	3	1
1:A:86:ILE:CG1	1:A:90:CYS:SG	0.55	2.95	4	1
1:A:100:VAL:CG1	1:A:140:LYS:HA	0.55	2.32	7	2
1:A:54:HIS:N	1:A:54:HIS:CD2	0.55	2.75	4	1
1:A:75:PRO:CB	1:A:108:ILE:HB	0.55	2.32	9	3
1:A:58:ILE:CG2	1:A:59:VAL:N	0.55	2.70	3	3
1:A:101:PRO:HG2	1:A:132:HIS:ND1	0.55	2.17	7	1
1:A:71:VAL:CG1	1:A:118:PHE:CZ	0.55	2.89	5	1
1:A:24:ASN:ND2	1:A:27:ILE:H	0.55	2.00	4	1
1:A:73:ILE:HG22	1:A:74:ASN:H	0.54	1.60	5	2
1:A:35:PHE:CZ	1:A:69:ARG:HB2	0.54	2.37	2	2
1:A:48:ALA:O	1:A:49:THR:CB	0.54	2.56	9	5
1:A:15:LYS:CG	1:A:54:HIS:CE1	0.54	2.90	7	1
1:A:38:MET:C	1:A:38:MET:SD	0.54	2.85	4	3
1:A:86:ILE:N	1:A:101:PRO:HG2	0.54	2.16	6	1
1:A:88:GLU:HG2	1:A:90:CYS:SG	0.54	2.43	3	1
1:A:28:GLN:HE21	1:A:29:ARG:HA	0.54	1.62	8	2
1:A:14:ARG:C	1:A:54:HIS:CE1	0.54	2.81	6	1
1:A:100:VAL:HG11	1:A:141:LEU:H	0.54	1.62	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:90:CYS:HA	1:A:136:HIS:CG	0.54	2.38	9	2
1:A:7:HIS:CE1	1:A:50:GLN:CD	0.54	2.81	2	1
1:A:58:ILE:CG1	1:A:59:VAL:N	0.54	2.71	6	3
1:A:15:LYS:HB2	1:A:137:LEU:HD11	0.54	1.79	2	1
1:A:129:CYS:HA	1:A:132:HIS:HB3	0.54	1.80	5	1
1:A:15:LYS:HB3	1:A:54:HIS:HE1	0.54	1.63	4	1
1:A:61:ASP:HA	1:A:69:ARG:HA	0.54	1.79	9	4
1:A:75:PRO:CG	1:A:108:ILE:HB	0.53	2.33	1	2
1:A:35:PHE:HE1	1:A:59:VAL:HB	0.53	1.64	7	4
1:A:7:HIS:ND1	1:A:91:LEU:HD12	0.53	2.17	2	1
1:A:59:VAL:HA	1:A:71:VAL:HA	0.53	1.80	4	3
1:A:91:LEU:HG	1:A:137:LEU:CG	0.53	2.33	7	1
1:A:12:ARG:O	1:A:14:ARG:N	0.53	2.41	8	2
1:A:7:HIS:HB3	1:A:92:SER:HA	0.53	1.78	6	1
1:A:131:GLN:O	1:A:135:ASP:N	0.53	2.42	1	4
1:A:5:VAL:C	1:A:51:VAL:HB	0.53	2.23	7	1
1:A:133:GLU:HA	1:A:136:HIS:HD1	0.53	1.63	2	3
1:A:47:ALA:CA	1:A:133:GLU:HB2	0.53	2.32	2	1
1:A:126:LEU:O	1:A:127:ALA:C	0.53	2.47	9	9
1:A:100:VAL:HG12	1:A:140:LYS:HB3	0.53	1.80	5	2
1:A:15:LYS:HZ2	1:A:50:GLN:HG2	0.53	1.63	4	1
1:A:15:LYS:NZ	1:A:50:GLN:HG2	0.53	2.18	4	1
1:A:34:MET:HB3	1:A:59:VAL:CG2	0.53	2.34	3	2
1:A:90:CYS:SG	1:A:142:PHE:HE1	0.53	2.27	9	2
1:A:133:GLU:CG	1:A:134:MET:N	0.53	2.64	2	1
1:A:15:LYS:CG	1:A:50:GLN:H	0.53	2.17	7	2
1:A:57:ILE:N	1:A:57:ILE:HD12	0.53	2.19	5	1
1:A:7:HIS:NE2	1:A:50:GLN:HB2	0.53	2.19	7	2
1:A:12:ARG:HB2	1:A:15:LYS:HG3	0.52	1.81	6	2
1:A:84:THR:HG23	1:A:85:GLY:N	0.52	2.19	1	3
1:A:15:LYS:CG	1:A:50:GLN:N	0.52	2.72	7	2
1:A:137:LEU:O	1:A:139:GLY:N	0.52	2.41	6	3
1:A:90:CYS:SG	1:A:136:HIS:CG	0.52	2.96	9	1
1:A:86:ILE:HG21	1:A:132:HIS:CG	0.52	2.39	4	1
1:A:129:CYS:O	1:A:133:GLU:HG2	0.52	2.04	7	4
1:A:128:ILE:O	1:A:132:HIS:N	0.52	2.42	2	3
1:A:88:GLU:CG	1:A:98:ALA:O	0.52	2.57	9	1
1:A:101:PRO:HD3	1:A:132:HIS:CE1	0.52	2.39	6	1
1:A:74:ASN:ND2	1:A:74:ASN:C	0.52	2.63	6	3
1:A:130:ILE:O	1:A:133:GLU:HB2	0.52	2.05	1	1
1:A:100:VAL:HG22	1:A:142:PHE:CA	0.52	2.34	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:53:ILE:C	1:A:54:HIS:CD2	0.52	2.82	6	2
1:A:127:ALA:O	1:A:131:GLN:CB	0.52	2.57	4	1
1:A:98:ALA:CB	1:A:142:PHE:CE2	0.52	2.92	2	1
1:A:90:CYS:HA	1:A:136:HIS:CE1	0.52	2.40	4	1
1:A:47:ALA:CB	1:A:91:LEU:HD13	0.52	2.35	9	1
1:A:90:CYS:CB	1:A:136:HIS:NE2	0.52	2.72	1	1
1:A:69:ARG:H	1:A:69:ARG:CD	0.52	2.18	9	1
1:A:107:LYS:HB2	1:A:121:GLU:HB3	0.52	1.79	4	2
1:A:90:CYS:CA	1:A:136:HIS:CD2	0.52	2.93	4	2
1:A:110:ALA:O	1:A:118:PHE:N	0.52	2.43	6	9
1:A:15:LYS:CG	1:A:54:HIS:NE2	0.52	2.73	7	1
1:A:28:GLN:C	1:A:28:GLN:CD	0.52	2.68	5	4
1:A:38:MET:O	1:A:38:MET:SD	0.52	2.68	4	2
1:A:90:CYS:HA	1:A:136:HIS:CD2	0.52	2.40	4	1
1:A:70:LEU:CG	1:A:71:VAL:H	0.51	2.16	8	4
1:A:15:LYS:CB	1:A:50:GLN:CA	0.51	2.86	9	2
1:A:18:LYS:O	1:A:55:GLN:HB3	0.51	2.06	8	1
1:A:56:ARG:HE	1:A:111:LEU:N	0.51	2.03	3	1
1:A:100:VAL:HG22	1:A:142:PHE:HA	0.51	1.80	9	1
1:A:98:ALA:HB3	1:A:142:PHE:CD1	0.51	2.40	9	1
1:A:29:ARG:O	1:A:33:ASP:N	0.51	2.43	8	2
1:A:74:ASN:N	1:A:75:PRO:CD	0.51	2.73	4	7
1:A:7:HIS:NE2	1:A:50:GLN:CA	0.51	2.74	7	1
1:A:15:LYS:HG2	1:A:50:GLN:CA	0.51	2.35	9	1
1:A:101:PRO:HG3	1:A:132:HIS:ND1	0.51	2.21	6	1
1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:HIS:HE2	0.51	1.65	9	1
1:A:108:ILE:HD13	1:A:120:LEU:H	0.51	1.64	5	3
1:A:15:LYS:CD	1:A:15:LYS:N	0.51	2.73	6	1
1:A:86:ILE:HG12	1:A:90:CYS:SG	0.51	2.45	4	1
1:A:15:LYS:CE	1:A:50:GLN:HG2	0.51	2.35	4	1
1:A:12:ARG:HB2	1:A:15:LYS:CG	0.51	2.36	1	2
1:A:58:ILE:HG12	1:A:72:LEU:CB	0.51	2.34	6	1
1:A:90:CYS:SG	1:A:136:HIS:CB	0.51	2.99	9	1
1:A:58:ILE:HB	1:A:72:LEU:HB3	0.51	1.81	2	2
1:A:91:LEU:CD1	1:A:93:ILE:H	0.51	2.19	5	1
1:A:12:ARG:CA	1:A:15:LYS:HG3	0.51	2.36	4	1
1:A:73:ILE:HG12	1:A:118:PHE:CZ	0.51	2.41	1	2
1:A:74:ASN:C	1:A:74:ASN:ND2	0.51	2.61	2	2
1:A:100:VAL:HB	1:A:101:PRO:HD3	0.51	1.83	4	1
1:A:39:TYR:CE2	1:A:61:ASP:CG	0.51	2.84	9	2
1:A:73:ILE:HD13	1:A:73:ILE:N	0.51	2.21	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:35:PHE:CZ	1:A:70:LEU:O	0.51	2.64	8	2
1:A:74:ASN:HD22	1:A:74:ASN:H	0.51	1.49	5	1
1:A:39:TYR:OH	1:A:61:ASP:N	0.51	2.44	9	2
1:A:137:LEU:C	1:A:139:GLY:N	0.51	2.63	6	4
1:A:47:ALA:HB3	1:A:91:LEU:HD22	0.51	1.83	9	1
1:A:7:HIS:NE2	1:A:12:ARG:O	0.51	2.43	8	1
1:A:75:PRO:HB3	1:A:108:ILE:HB	0.51	1.83	9	2
1:A:7:HIS:CD2	1:A:50:GLN:HB3	0.51	2.41	8	1
1:A:34:MET:CB	1:A:59:VAL:HG22	0.50	2.34	3	3
1:A:58:ILE:HG22	1:A:59:VAL:N	0.50	2.21	9	3
1:A:134:MET:SD	1:A:134:MET:O	0.50	2.70	3	1
1:A:108:ILE:CD1	1:A:120:LEU:O	0.50	2.60	6	2
1:A:12:ARG:HB2	1:A:50:GLN:HB3	0.50	1.82	8	1
1:A:7:HIS:HB2	1:A:92:SER:C	0.50	2.27	5	1
1:A:36:GLU:O	1:A:40:ALA:HB3	0.50	2.06	9	2
1:A:12:ARG:NE	1:A:50:GLN:HA	0.50	2.21	8	1
1:A:101:PRO:CG	1:A:132:HIS:ND1	0.50	2.74	6	2
1:A:34:MET:SD	1:A:130:ILE:HG21	0.50	2.46	2	4
1:A:126:LEU:O	1:A:129:CYS:N	0.50	2.45	6	6
1:A:62:VAL:H	1:A:69:ARG:NH2	0.50	2.05	5	1
1:A:101:PRO:HG3	1:A:132:HIS:CG	0.50	2.40	6	1
1:A:91:LEU:HB3	1:A:137:LEU:CD1	0.50	2.35	6	1
1:A:132:HIS:O	1:A:133:GLU:C	0.50	2.50	9	3
1:A:7:HIS:NE2	1:A:50:GLN:N	0.50	2.59	7	1
1:A:86:ILE:HD13	1:A:132:HIS:CE1	0.50	2.42	7	1
1:A:134:MET:C	1:A:136:HIS:H	0.50	2.09	6	4
1:A:23:VAL:HG12	1:A:24:ASN:N	0.50	2.22	8	5
1:A:108:ILE:O	1:A:119:GLU:HA	0.50	2.07	5	7
1:A:47:ALA:CA	1:A:133:GLU:HB3	0.50	2.36	9	3
1:A:20:VAL:HB	1:A:56:ARG:NE	0.50	2.21	4	2
1:A:90:CYS:SG	1:A:136:HIS:HE1	0.50	2.16	8	1
1:A:90:CYS:HB3	1:A:136:HIS:CE1	0.50	2.39	5	1
1:A:53:ILE:C	1:A:54:HIS:CG	0.50	2.85	6	3
1:A:47:ALA:HB2	1:A:91:LEU:HD13	0.50	1.84	9	1
1:A:61:ASP:CG	1:A:69:ARG:CB	0.50	2.80	9	1
1:A:47:ALA:HA	1:A:133:GLU:CB	0.49	2.37	4	2
1:A:98:ALA:CB	1:A:142:PHE:CE1	0.49	2.95	6	1
1:A:90:CYS:HB2	1:A:142:PHE:CE1	0.49	2.42	7	1
1:A:28:GLN:HE22	1:A:32:ASP:CB	0.49	2.19	5	2
1:A:15:LYS:HE2	1:A:16:VAL:N	0.49	2.22	4	1
1:A:129:CYS:O	1:A:132:HIS:CB	0.49	2.57	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:57:ILE:CG2	1:A:73:ILE:CD1	0.49	2.90	1	1
1:A:84:THR:CG2	1:A:85:GLY:N	0.49	2.75	1	2
1:A:100:VAL:CG1	1:A:141:LEU:N	0.49	2.75	3	2
1:A:58:ILE:N	1:A:58:ILE:CD1	0.49	2.75	9	1
1:A:12:ARG:CB	1:A:15:LYS:CG	0.49	2.90	4	4
1:A:73:ILE:HG21	1:A:110:ALA:HB1	0.49	1.83	9	3
1:A:24:ASN:HD21	1:A:27:ILE:H	0.49	1.51	4	1
1:A:29:ARG:O	1:A:33:ASP:CB	0.49	2.61	6	4
1:A:7:HIS:CD2	1:A:12:ARG:HG2	0.49	2.41	2	1
1:A:137:LEU:N	1:A:137:LEU:CD1	0.49	2.75	7	1
1:A:23:VAL:CG1	1:A:24:ASN:N	0.49	2.75	7	5
1:A:12:ARG:HG3	1:A:13:LEU:H	0.49	1.68	2	2
1:A:91:LEU:HB2	1:A:137:LEU:HD21	0.49	1.84	9	1
1:A:126:LEU:C	1:A:128:ILE:N	0.49	2.61	9	2
1:A:56:ARG:HB3	1:A:74:ASN:ND2	0.49	2.22	6	2
1:A:39:TYR:OH	1:A:69:ARG:HB2	0.49	2.08	4	2
1:A:90:CYS:HA	1:A:136:HIS:NE2	0.49	2.22	4	1
1:A:73:ILE:C	1:A:75:PRO:HD3	0.49	2.28	4	4
1:A:108:ILE:H	1:A:108:ILE:HD13	0.49	1.68	6	1
1:A:35:PHE:CD1	1:A:59:VAL:HB	0.49	2.42	1	1
1:A:58:ILE:HB	1:A:72:LEU:CB	0.49	2.38	2	1
1:A:134:MET:O	1:A:138:VAL:N	0.49	2.45	5	2
1:A:15:LYS:CG	1:A:50:GLN:HG2	0.49	2.38	6	1
1:A:98:ALA:HB1	1:A:100:VAL:H	0.49	1.66	4	1
1:A:7:HIS:NE2	1:A:50:GLN:CG	0.48	2.76	3	1
1:A:20:VAL:CG1	1:A:22:GLU:O	0.48	2.60	3	1
1:A:100:VAL:HB	1:A:101:PRO:CD	0.48	2.37	2	2
1:A:35:PHE:CA	1:A:59:VAL:HG21	0.48	2.38	8	1
1:A:15:LYS:CB	1:A:50:GLN:HG2	0.48	2.38	6	1
1:A:34:MET:O	1:A:38:MET:N	0.48	2.45	3	4
1:A:49:THR:HG23	1:A:49:THR:O	0.48	2.08	9	1
1:A:98:ALA:HB3	1:A:142:PHE:CE1	0.48	2.43	9	1
1:A:73:ILE:HG13	1:A:108:ILE:HG21	0.48	1.85	6	2
1:A:128:ILE:CD1	1:A:128:ILE:N	0.48	2.76	7	2
1:A:100:VAL:HG11	1:A:141:LEU:N	0.48	2.23	7	1
1:A:20:VAL:HG12	1:A:21:GLU:N	0.48	2.22	3	3
1:A:12:ARG:NE	1:A:15:LYS:HB2	0.48	2.23	8	1
1:A:58:ILE:N	1:A:72:LEU:O	0.48	2.47	9	3
1:A:73:ILE:C	1:A:75:PRO:CD	0.48	2.82	5	3
1:A:110:ALA:N	1:A:118:PHE:O	0.48	2.46	5	1
1:A:90:CYS:HB3	1:A:136:HIS:CD2	0.48	2.42	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:15:LYS:CB	1:A:50:GLN:N	0.48	2.77	7	2
1:A:128:ILE:O	1:A:132:HIS:HB2	0.48	2.08	2	1
1:A:28:GLN:NE2	1:A:29:ARG:HA	0.48	2.24	2	6
1:A:34:MET:SD	1:A:46:LEU:CD1	0.48	3.02	7	1
1:A:91:LEU:HG	1:A:137:LEU:HD12	0.48	1.84	7	1
1:A:15:LYS:HA	1:A:15:LYS:CE	0.48	2.39	9	1
1:A:49:THR:CG2	1:A:49:THR:O	0.48	2.61	7	1
1:A:50:GLN:NE2	1:A:91:LEU:CD2	0.48	2.77	6	1
1:A:12:ARG:CG	1:A:13:LEU:N	0.48	2.77	1	2
1:A:34:MET:SD	1:A:58:ILE:HA	0.48	2.49	1	1
1:A:85:GLY:HA3	1:A:101:PRO:HD2	0.48	1.86	7	1
1:A:101:PRO:HG2	1:A:132:HIS:HA	0.48	1.85	7	1
1:A:15:LYS:HB3	1:A:50:GLN:N	0.48	2.24	9	2
1:A:56:ARG:HE	1:A:111:LEU:HB2	0.48	1.69	6	1
1:A:15:LYS:HG2	1:A:50:GLN:O	0.48	2.09	4	1
1:A:103:ALA:CB	1:A:131:GLN:NE2	0.48	2.77	1	1
1:A:73:ILE:HD11	1:A:118:PHE:CE1	0.48	2.44	5	2
1:A:86:ILE:HD13	1:A:86:ILE:H	0.48	1.69	3	1
1:A:50:GLN:NE2	1:A:137:LEU:HG	0.48	2.24	6	2
1:A:55:GLN:NE2	1:A:56:ARG:CZ	0.48	2.77	8	1
1:A:12:ARG:CD	1:A:15:LYS:HG3	0.48	2.39	5	1
1:A:7:HIS:CE1	1:A:49:THR:C	0.47	2.86	7	1
1:A:24:ASN:ND2	1:A:26:GLU:H	0.47	2.06	9	1
1:A:100:VAL:HG21	1:A:142:PHE:H	0.47	1.69	4	1
1:A:127:ALA:O	1:A:131:GLN:HB3	0.47	2.09	4	6
1:A:73:ILE:N	1:A:73:ILE:HD13	0.47	2.23	2	3
1:A:12:ARG:HB3	1:A:15:LYS:HG3	0.47	1.85	5	2
1:A:98:ALA:CB	1:A:142:PHE:CZ	0.47	2.97	2	1
1:A:108:ILE:HG12	1:A:109:ARG:N	0.47	2.23	2	2
1:A:108:ILE:HD13	1:A:120:LEU:O	0.47	2.09	2	3
1:A:12:ARG:HD3	1:A:54:HIS:ND1	0.47	2.24	8	1
1:A:93:ILE:HG13	1:A:94:PRO:CD	0.47	2.39	8	1
1:A:69:ARG:HE	1:A:69:ARG:H	0.47	1.51	4	1
1:A:27:ILE:CG2	1:A:28:GLN:N	0.47	2.77	4	1
1:A:75:PRO:CD	1:A:108:ILE:HB	0.47	2.39	1	1
1:A:46:LEU:C	1:A:133:GLU:HG3	0.47	2.29	1	1
1:A:39:TYR:OH	1:A:61:ASP:HB3	0.47	2.09	7	2
1:A:108:ILE:HD13	1:A:110:ALA:HB3	0.47	1.85	3	1
1:A:15:LYS:CE	1:A:15:LYS:H	0.47	2.22	6	1
1:A:49:THR:CG2	1:A:137:LEU:HD11	0.47	2.40	1	1
1:A:75:PRO:HG3	1:A:108:ILE:CG2	0.47	2.39	9	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:29:ARG:HG2	1:A:33:ASP:HB2	0.47	1.86	2	1
1:A:56:ARG:NH1	1:A:56:ARG:HG3	0.47	2.24	6	1
1:A:141:LEU:HD23	1:A:141:LEU:H	0.47	1.70	4	1
1:A:73:ILE:CB	1:A:110:ALA:HB1	0.47	2.39	1	1
1:A:86:ILE:HG13	1:A:132:HIS:NE2	0.47	2.25	4	3
1:A:20:VAL:HG21	1:A:56:ARG:H	0.47	1.69	3	1
1:A:15:LYS:CG	1:A:50:GLN:HA	0.47	2.40	9	1
1:A:41:GLU:O	1:A:42:GLU:CB	0.47	2.62	6	1
1:A:73:ILE:CG1	1:A:110:ALA:CB	0.47	2.93	1	1
1:A:49:THR:O	1:A:50:GLN:CB	0.47	2.62	1	1
1:A:101:PRO:CG	1:A:132:HIS:HA	0.47	2.39	7	1
1:A:28:GLN:NE2	1:A:32:ASP:CB	0.47	2.78	3	3
1:A:86:ILE:CD1	1:A:101:PRO:HG2	0.47	2.39	3	1
1:A:7:HIS:CE1	1:A:12:ARG:O	0.47	2.68	3	2
1:A:100:VAL:CG2	1:A:142:PHE:HA	0.47	2.40	9	1
1:A:98:ALA:CB	1:A:142:PHE:CD1	0.47	2.98	8	1
1:A:15:LYS:HE2	1:A:16:VAL:H	0.47	1.69	4	1
1:A:51:VAL:HG22	1:A:52:ASP:N	0.47	2.25	9	1
1:A:58:ILE:HG23	1:A:73:ILE:HA	0.47	1.84	8	1
1:A:35:PHE:CZ	1:A:69:ARG:HG2	0.47	2.44	4	1
1:A:15:LYS:CE	1:A:50:GLN:CG	0.47	2.92	4	1
1:A:88:GLU:CB	1:A:136:HIS:NE2	0.47	2.77	7	1
1:A:91:LEU:CB	1:A:137:LEU:HD11	0.47	2.40	9	1
1:A:69:ARG:HD2	1:A:69:ARG:N	0.47	2.23	5	1
1:A:34:MET:CG	1:A:59:VAL:HG22	0.47	2.39	3	1
1:A:15:LYS:HG2	1:A:51:VAL:H	0.47	1.70	9	1
1:A:49:THR:HG23	1:A:137:LEU:HB2	0.47	1.86	9	1
1:A:53:ILE:C	1:A:54:HIS:ND1	0.47	2.68	8	1
1:A:91:LEU:HG	1:A:92:SER:N	0.47	2.25	8	1
1:A:35:PHE:CE1	1:A:69:ARG:CG	0.47	2.98	4	2
1:A:37:THR:O	1:A:39:TYR:N	0.46	2.48	1	2
1:A:86:ILE:CG1	1:A:87:GLU:N	0.46	2.77	9	1
1:A:141:LEU:N	1:A:141:LEU:HD12	0.46	2.25	3	1
1:A:39:TYR:OH	1:A:69:ARG:CG	0.46	2.63	8	1
1:A:35:PHE:CZ	1:A:69:ARG:CG	0.46	2.99	4	1
1:A:7:HIS:CE1	1:A:49:THR:O	0.46	2.69	7	1
1:A:47:ALA:HB1	1:A:137:LEU:HD11	0.46	1.88	7	1
1:A:89:GLY:HA2	1:A:142:PHE:CE2	0.46	2.45	3	1
1:A:7:HIS:CG	1:A:12:ARG:HB2	0.46	2.45	3	1
1:A:56:ARG:HB3	1:A:74:ASN:CG	0.46	2.31	9	1
1:A:34:MET:SD	1:A:130:ILE:CG2	0.46	3.04	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:34:MET:HG2	1:A:58:ILE:HG23	0.46	1.88	5	1
1:A:62:VAL:H	1:A:69:ARG:CZ	0.46	2.22	5	1
1:A:108:ILE:HD13	1:A:110:ALA:CB	0.46	2.40	3	1
1:A:20:VAL:CG1	1:A:21:GLU:N	0.46	2.78	3	3
1:A:5:VAL:CG1	1:A:50:GLN:NE2	0.46	2.79	2	1
1:A:86:ILE:HG13	1:A:132:HIS:CD2	0.46	2.46	4	1
1:A:37:THR:O	1:A:38:MET:C	0.46	2.53	2	4
1:A:7:HIS:CG	1:A:50:GLN:NE2	0.46	2.84	2	1
1:A:5:VAL:HG11	1:A:50:GLN:H	0.46	1.70	8	1
1:A:135:ASP:O	1:A:140:LYS:CG	0.46	2.64	5	1
1:A:72:LEU:C	1:A:73:ILE:HD13	0.46	2.31	4	1
1:A:101:PRO:CD	1:A:132:HIS:CE1	0.46	2.99	7	2
1:A:7:HIS:NE2	1:A:49:THR:C	0.46	2.69	7	1
1:A:100:VAL:HG22	1:A:142:PHE:CD1	0.46	2.46	3	1
1:A:34:MET:SD	1:A:37:THR:HB	0.46	2.50	3	1
1:A:73:ILE:CD1	1:A:73:ILE:N	0.46	2.76	9	2
1:A:69:ARG:CD	1:A:69:ARG:H	0.46	2.23	8	1
1:A:27:ILE:C	1:A:29:ARG:N	0.46	2.68	8	1
1:A:39:TYR:CE1	1:A:69:ARG:HG3	0.46	2.45	5	1
1:A:7:HIS:ND1	1:A:13:LEU:HA	0.46	2.26	5	1
1:A:69:ARG:HD3	1:A:69:ARG:N	0.46	2.26	8	2
1:A:89:GLY:HA2	1:A:142:PHE:CZ	0.46	2.46	1	1
1:A:15:LYS:HG3	1:A:50:GLN:HA	0.46	1.87	3	1
1:A:98:ALA:HB2	1:A:142:PHE:CE2	0.46	2.45	2	1
1:A:12:ARG:HD2	1:A:54:HIS:ND1	0.46	2.25	8	1
1:A:97:ARG:O	1:A:98:ALA:CB	0.46	2.63	3	1
1:A:88:GLU:HB3	1:A:98:ALA:H	0.46	1.67	9	1
1:A:83:GLU:CD	1:A:83:GLU:N	0.46	2.69	9	2
1:A:22:GLU:H	1:A:22:GLU:CD	0.46	2.15	3	1
1:A:100:VAL:CB	1:A:140:LYS:HB2	0.46	2.41	5	1
1:A:98:ALA:HB2	1:A:142:PHE:HE1	0.46	1.70	4	1
1:A:18:LYS:HB3	1:A:54:HIS:O	0.45	2.11	1	2
1:A:128:ILE:HD12	1:A:128:ILE:N	0.45	2.26	7	1
1:A:51:VAL:CG2	1:A:52:ASP:H	0.45	2.24	7	1
1:A:137:LEU:O	1:A:138:VAL:C	0.45	2.54	3	3
1:A:5:VAL:CG1	1:A:7:HIS:NE2	0.45	2.79	9	1
1:A:90:CYS:SG	1:A:136:HIS:HA	0.45	2.51	9	1
1:A:58:ILE:C	1:A:59:VAL:HG13	0.45	2.30	9	1
1:A:53:ILE:O	1:A:54:HIS:CD2	0.45	2.69	5	1
1:A:7:HIS:CE1	1:A:50:GLN:C	0.45	2.89	4	1
1:A:61:ASP:CG	1:A:69:ARG:HB3	0.45	2.31	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:75:PRO:HG2	1:A:76:GLU:N	0.45	2.26	1	1
1:A:57:ILE:HA	1:A:73:ILE:HG22	0.45	1.88	7	1
1:A:79:GLU:CG	1:A:80:LYS:N	0.45	2.78	3	3
1:A:86:ILE:H	1:A:101:PRO:CD	0.45	2.24	6	1
1:A:100:VAL:CG2	1:A:141:LEU:HA	0.45	2.32	4	1
1:A:75:PRO:CG	1:A:76:GLU:N	0.45	2.79	1	1
1:A:90:CYS:O	1:A:91:LEU:HB2	0.45	2.11	7	1
1:A:95:GLU:H	1:A:95:GLU:CD	0.45	2.15	8	1
1:A:58:ILE:HB	1:A:72:LEU:O	0.45	2.11	1	1
1:A:87:GLU:HG3	1:A:88:GLU:H	0.45	1.71	9	1
1:A:79:GLU:HB3	1:A:107:LYS:HB3	0.45	1.87	4	1
1:A:131:GLN:O	1:A:134:MET:N	0.45	2.50	1	2
1:A:107:LYS:HA	1:A:121:GLU:HA	0.45	1.87	5	3
1:A:73:ILE:N	1:A:73:ILE:CD1	0.45	2.79	2	2
1:A:126:LEU:N	1:A:126:LEU:HD22	0.45	2.27	1	2
1:A:15:LYS:O	1:A:16:VAL:C	0.45	2.55	9	1
1:A:7:HIS:CG	1:A:50:GLN:CB	0.45	3.00	9	1
1:A:49:THR:HG22	1:A:50:GLN:H	0.45	1.72	2	1
1:A:47:ALA:CB	1:A:91:LEU:HD23	0.45	2.42	5	1
1:A:73:ILE:CG2	1:A:110:ALA:CB	0.45	2.94	6	2
1:A:60:ILE:HG13	1:A:70:LEU:HB3	0.45	1.89	2	1
1:A:28:GLN:HE22	1:A:32:ASP:HB2	0.45	1.71	5	1
1:A:133:GLU:O	1:A:137:LEU:CD1	0.45	2.64	6	1
1:A:86:ILE:HG13	1:A:132:HIS:CE1	0.45	2.47	1	1
1:A:136:HIS:O	1:A:140:LYS:HB3	0.45	2.11	7	1
1:A:73:ILE:HG13	1:A:75:PRO:N	0.45	2.27	8	2
1:A:100:VAL:CG2	1:A:142:PHE:CA	0.45	2.95	9	1
1:A:7:HIS:CB	1:A:92:SER:HB3	0.45	2.40	9	2
1:A:101:PRO:HG3	1:A:136:HIS:HA	0.45	1.88	5	1
1:A:34:MET:SD	1:A:130:ILE:HD11	0.45	2.52	4	2
1:A:52:ASP:C	1:A:54:HIS:NE2	0.45	2.70	4	1
1:A:86:ILE:HD12	1:A:132:HIS:CD2	0.45	2.46	3	1
1:A:7:HIS:CG	1:A:50:GLN:HB3	0.45	2.47	9	1
1:A:38:MET:SD	1:A:38:MET:O	0.45	2.74	2	1
1:A:7:HIS:N	1:A:92:SER:HB3	0.45	2.27	8	1
1:A:28:GLN:HG3	1:A:29:ARG:N	0.45	2.27	1	3
1:A:91:LEU:HG	1:A:137:LEU:CD1	0.45	2.42	7	1
1:A:100:VAL:HG12	1:A:140:LYS:HB2	0.45	1.88	3	1
1:A:38:MET:CE	1:A:126:LEU:HB3	0.45	2.41	9	1
1:A:7:HIS:HE2	1:A:12:ARG:CB	0.45	2.25	2	1
1:A:73:ILE:CG2	1:A:118:PHE:CZ	0.45	3.00	6	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:137:LEU:HD13	1:A:138:VAL:N	0.45	2.27	8	1
1:A:121:GLU:CD	1:A:121:GLU:H	0.45	2.16	8	1
1:A:86:ILE:HD11	1:A:136:HIS:NE2	0.45	2.27	5	1
1:A:98:ALA:HA	1:A:142:PHE:CE1	0.45	2.47	4	1
1:A:53:ILE:O	1:A:54:HIS:CG	0.44	2.70	9	2
1:A:27:ILE:O	1:A:28:GLN:C	0.44	2.56	8	4
1:A:36:GLU:O	1:A:40:ALA:CB	0.44	2.65	9	1
1:A:62:VAL:H	1:A:69:ARG:CA	0.44	2.25	8	1
1:A:7:HIS:CD2	1:A:50:GLN:O	0.44	2.71	9	1
1:A:100:VAL:CG2	1:A:142:PHE:HD2	0.44	2.24	8	1
1:A:93:ILE:HG13	1:A:94:PRO:HD3	0.44	1.89	8	1
1:A:49:THR:OG1	1:A:54:HIS:CG	0.44	2.71	1	1
1:A:100:VAL:CG1	1:A:141:LEU:H	0.44	2.25	7	1
1:A:58:ILE:C	1:A:59:VAL:CG1	0.44	2.86	9	2
1:A:7:HIS:ND1	1:A:92:SER:OG	0.44	2.50	2	1
1:A:56:ARG:CZ	1:A:111:LEU:HB3	0.44	2.42	4	1
1:A:35:PHE:O	1:A:39:TYR:CD1	0.44	2.70	3	1
1:A:91:LEU:HB3	1:A:92:SER:OG	0.44	2.13	2	1
1:A:50:GLN:NE2	1:A:137:LEU:CD2	0.44	2.80	6	1
1:A:18:LYS:CG	1:A:18:LYS:O	0.44	2.65	8	1
1:A:18:LYS:CB	1:A:54:HIS:CD2	0.44	2.99	8	1
1:A:91:LEU:HA	1:A:94:PRO:CD	0.44	2.42	6	1
1:A:55:GLN:HG2	1:A:56:ARG:H	0.44	1.71	7	1
1:A:57:ILE:CA	1:A:73:ILE:HG22	0.44	2.42	7	1
1:A:62:VAL:HG22	1:A:68:GLU:HA	0.44	1.90	9	1
1:A:35:PHE:CD1	1:A:39:TYR:OH	0.44	2.66	8	1
1:A:18:LYS:O	1:A:55:GLN:CB	0.44	2.65	8	1
1:A:28:GLN:CG	1:A:29:ARG:N	0.44	2.81	2	4
1:A:86:ILE:H	1:A:101:PRO:CG	0.44	2.25	6	1
1:A:47:ALA:C	1:A:49:THR:H	0.44	2.16	4	1
1:A:26:GLU:CD	1:A:26:GLU:H	0.44	2.15	1	1
1:A:75:PRO:HG3	1:A:108:ILE:HG22	0.44	1.89	9	1
1:A:98:ALA:HB3	1:A:142:PHE:CG	0.44	2.48	8	1
1:A:108:ILE:CD1	1:A:120:LEU:H	0.44	2.26	6	1
1:A:91:LEU:CG	1:A:92:SER:N	0.43	2.81	8	2
1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:HIS:NE2	0.43	2.27	9	1
1:A:30:ILE:O	1:A:34:MET:HB2	0.43	2.12	4	2
1:A:37:THR:O	1:A:40:ALA:N	0.43	2.51	3	2
1:A:41:GLU:CD	1:A:43:GLY:H	0.43	2.16	3	1
1:A:35:PHE:CZ	1:A:61:ASP:OD1	0.43	2.71	3	1
1:A:5:VAL:HB	1:A:51:VAL:CG2	0.43	2.43	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:7:HIS:NE2	1:A:51:VAL:CG1	0.43	2.81	7	1
1:A:7:HIS:CD2	1:A:50:GLN:C	0.43	2.91	9	1
1:A:126:LEU:O	1:A:130:ILE:N	0.43	2.51	9	1
1:A:27:ILE:O	1:A:29:ARG:N	0.43	2.52	8	1
1:A:37:THR:O	1:A:41:GLU:N	0.43	2.52	1	3
1:A:125:LEU:HD23	1:A:125:LEU:H	0.43	1.73	3	1
1:A:135:ASP:C	1:A:137:LEU:N	0.43	2.71	2	1
1:A:98:ALA:CA	1:A:142:PHE:CE1	0.43	3.02	4	1
1:A:141:LEU:HG	1:A:142:PHE:CE2	0.43	2.48	4	1
1:A:47:ALA:HB2	1:A:91:LEU:CD1	0.43	2.43	4	1
1:A:70:LEU:HG	1:A:71:VAL:H	0.43	1.72	1	3
1:A:73:ILE:CG1	1:A:118:PHE:CZ	0.43	3.01	1	1
1:A:108:ILE:HD13	1:A:108:ILE:H	0.43	1.72	2	1
1:A:110:ALA:O	1:A:117:PRO:HA	0.43	2.14	5	1
1:A:15:LYS:HE3	1:A:50:GLN:CB	0.43	2.44	4	1
1:A:132:HIS:CG	1:A:133:GLU:N	0.43	2.86	3	1
1:A:86:ILE:N	1:A:101:PRO:HD2	0.43	2.27	8	1
1:A:7:HIS:CA	1:A:92:SER:HB3	0.43	2.44	8	1
1:A:98:ALA:HB2	1:A:142:PHE:CE1	0.43	2.48	6	1
1:A:28:GLN:NE2	1:A:32:ASP:HB3	0.43	2.29	4	1
1:A:15:LYS:HG3	1:A:50:GLN:HG2	0.43	1.90	1	1
1:A:88:GLU:CG	1:A:89:GLY:H	0.43	2.25	4	2
1:A:47:ALA:O	1:A:48:ALA:O	0.43	2.37	2	1
1:A:47:ALA:O	1:A:49:THR:N	0.43	2.52	3	2
1:A:73:ILE:HD12	1:A:118:PHE:CE2	0.43	2.48	9	1
1:A:38:MET:SD	1:A:61:ASP:OD2	0.43	2.77	2	1
1:A:74:ASN:ND2	1:A:74:ASN:H	0.43	2.11	5	1
1:A:12:ARG:C	1:A:15:LYS:HE2	0.43	2.34	6	1
1:A:15:LYS:CD	1:A:15:LYS:H	0.43	2.27	6	2
1:A:84:THR:CG2	1:A:85:GLY:H	0.43	2.27	1	1
1:A:58:ILE:CG1	1:A:59:VAL:H	0.43	2.25	3	1
1:A:15:LYS:O	1:A:137:LEU:HG	0.43	2.14	2	1
1:A:130:ILE:C	1:A:132:HIS:H	0.43	2.16	8	1
1:A:79:GLU:HG2	1:A:80:LYS:N	0.42	2.28	3	2
1:A:131:GLN:O	1:A:132:HIS:C	0.42	2.57	3	1
1:A:16:VAL:O	1:A:17:ALA:O	0.42	2.37	9	1
1:A:39:TYR:CD1	1:A:61:ASP:CG	0.42	2.92	8	1
1:A:59:VAL:O	1:A:130:ILE:HD12	0.42	2.14	6	1
1:A:74:ASN:N	1:A:74:ASN:HD22	0.42	2.05	1	1
1:A:28:GLN:NE2	1:A:28:GLN:O	0.42	2.52	3	2
1:A:85:GLY:HA2	1:A:101:PRO:HG2	0.42	1.91	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:58:ILE:HG12	1:A:72:LEU:HB3	0.42	1.91	6	1
1:A:34:MET:HG2	1:A:58:ILE:HG22	0.42	1.90	4	1
1:A:101:PRO:HG2	1:A:132:HIS:CG	0.42	2.49	7	1
1:A:7:HIS:NE2	1:A:50:GLN:CB	0.42	2.82	7	1
1:A:73:ILE:HG12	1:A:110:ALA:CB	0.42	2.45	7	1
1:A:7:HIS:NE2	1:A:50:GLN:HG2	0.42	2.29	3	1
1:A:61:ASP:O	1:A:62:VAL:C	0.42	2.54	8	1
1:A:137:LEU:C	1:A:139:GLY:H	0.42	2.17	5	1
1:A:60:ILE:O	1:A:70:LEU:N	0.42	2.52	1	1
1:A:100:VAL:HG22	1:A:142:PHE:CE1	0.42	2.49	3	1
1:A:91:LEU:HG	1:A:92:SER:H	0.42	1.73	3	1
1:A:89:GLY:O	1:A:136:HIS:CE1	0.42	2.73	9	1
1:A:57:ILE:HD13	1:A:112:ASP:HA	0.42	1.90	2	1
1:A:35:PHE:HD1	1:A:39:TYR:CE1	0.42	2.29	8	1
1:A:41:GLU:C	1:A:43:GLY:N	0.42	2.72	8	1
1:A:20:VAL:HG11	1:A:56:ARG:NH2	0.42	2.30	6	1
1:A:98:ALA:CA	1:A:142:PHE:HE1	0.42	2.27	4	1
1:A:57:ILE:HG23	1:A:73:ILE:HD11	0.42	1.91	1	2
1:A:31:VAL:HG13	1:A:71:VAL:CG2	0.42	2.44	9	2
1:A:7:HIS:NE2	1:A:50:GLN:CD	0.42	2.73	3	1
1:A:49:THR:CG2	1:A:54:HIS:CD2	0.42	3.03	5	1
1:A:41:GLU:O	1:A:43:GLY:N	0.42	2.52	1	1
1:A:84:THR:OG1	1:A:85:GLY:N	0.42	2.49	3	1
1:A:35:PHE:CD2	1:A:69:ARG:CG	0.42	3.03	7	1
1:A:28:GLN:O	1:A:29:ARG:C	0.42	2.58	7	3
1:A:88:GLU:CG	1:A:89:GLY:N	0.42	2.82	3	1
1:A:28:GLN:O	1:A:31:VAL:N	0.42	2.52	3	1
1:A:139:GLY:O	1:A:140:LYS:C	0.42	2.57	9	1
1:A:86:ILE:HD13	1:A:132:HIS:NE2	0.42	2.30	2	1
1:A:139:GLY:O	1:A:140:LYS:O	0.42	2.37	6	1
1:A:35:PHE:CD2	1:A:59:VAL:HG11	0.42	2.50	6	1
1:A:76:GLU:N	1:A:76:GLU:CD	0.42	2.73	3	1
1:A:135:ASP:HA	1:A:138:VAL:HG13	0.42	1.90	9	1
1:A:23:VAL:HG22	1:A:56:ARG:CD	0.42	2.45	8	1
1:A:15:LYS:CB	1:A:50:GLN:CG	0.42	2.97	6	1
1:A:28:GLN:HE21	1:A:29:ARG:CA	0.42	2.28	1	1
1:A:12:ARG:HB3	1:A:15:LYS:HG2	0.42	1.87	5	1
1:A:39:TYR:OH	1:A:69:ARG:CB	0.42	2.68	4	1
1:A:57:ILE:HD13	1:A:112:ASP:C	0.42	2.36	4	1
1:A:91:LEU:O	1:A:93:ILE:N	0.42	2.53	1	1
1:A:39:TYR:OH	1:A:69:ARG:HB3	0.42	2.14	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:28:GLN:HE21	1:A:32:ASP:CB	0.42	2.27	4	1
1:A:86:ILE:HG12	1:A:132:HIS:CD2	0.41	2.50	8	1
1:A:62:VAL:H	1:A:69:ARG:N	0.41	2.13	8	1
1:A:84:THR:HG23	1:A:85:GLY:H	0.41	1.75	8	1
1:A:81:SER:OG	1:A:105:LYS:HB2	0.41	2.15	8	1
1:A:49:THR:OG1	1:A:50:GLN:N	0.41	2.53	6	1
1:A:137:LEU:HD22	1:A:137:LEU:H	0.41	1.74	9	1
1:A:7:HIS:ND1	1:A:50:GLN:CB	0.41	2.83	9	1
1:A:12:ARG:NE	1:A:52:ASP:HA	0.41	2.30	5	1
1:A:15:LYS:N	1:A:54:HIS:CE1	0.41	2.88	6	1
1:A:85:GLY:HA2	1:A:101:PRO:CG	0.41	2.46	6	1
1:A:46:LEU:O	1:A:133:GLU:CB	0.41	2.68	4	1
1:A:134:MET:HA	1:A:137:LEU:CD2	0.41	2.44	1	1
1:A:126:LEU:HA	1:A:129:CYS:HB2	0.41	1.92	7	1
1:A:108:ILE:HG13	1:A:120:LEU:O	0.41	2.14	3	1
1:A:38:MET:CE	1:A:130:ILE:HD11	0.41	2.45	9	1
1:A:35:PHE:HB3	1:A:39:TYR:CE2	0.41	2.50	8	1
1:A:97:ARG:O	1:A:98:ALA:HB2	0.41	2.16	5	1
1:A:90:CYS:SG	1:A:136:HIS:HD2	0.41	2.24	4	1
1:A:126:LEU:H	1:A:126:LEU:HD22	0.41	1.75	1	1
1:A:73:ILE:HG22	1:A:74:ASN:ND2	0.41	2.31	5	1
1:A:42:GLU:N	1:A:42:GLU:CD	0.41	2.74	5	1
1:A:51:VAL:HG22	1:A:52:ASP:H	0.41	1.76	7	1
1:A:18:LYS:HG2	1:A:18:LYS:O	0.41	2.16	8	1
1:A:88:GLU:HG3	1:A:136:HIS:CD2	0.41	2.50	5	1
1:A:49:THR:C	1:A:50:GLN:NE2	0.41	2.74	5	1
1:A:86:ILE:HG13	1:A:90:CYS:SG	0.41	2.54	4	1
1:A:15:LYS:O	1:A:54:HIS:CD2	0.41	2.73	4	1
1:A:74:ASN:H	1:A:74:ASN:ND2	0.41	2.13	7	1
1:A:133:GLU:O	1:A:137:LEU:HD22	0.41	2.16	9	1
1:A:73:ILE:HG12	1:A:110:ALA:HB1	0.41	1.93	8	1
1:A:84:THR:HG22	1:A:103:ALA:O	0.41	2.15	6	1
1:A:84:THR:N	1:A:102:ARG:HB2	0.41	2.31	4	1
1:A:35:PHE:CG	1:A:59:VAL:HG21	0.41	2.51	8	1
1:A:35:PHE:HA	1:A:59:VAL:HG21	0.41	1.93	8	2
1:A:7:HIS:N	1:A:92:SER:HA	0.41	2.31	5	1
1:A:58:ILE:O	1:A:71:VAL:HA	0.41	2.15	6	1
1:A:34:MET:O	1:A:38:MET:HB2	0.41	2.15	4	1
1:A:7:HIS:NE2	1:A:50:GLN:C	0.41	2.74	4	1
1:A:37:THR:C	1:A:39:TYR:N	0.41	2.73	1	1
1:A:48:ALA:HB3	1:A:134:MET:CB	0.41	2.45	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:50:GLN:NE2	1:A:91:LEU:HD22	0.41	2.31	7	1
1:A:111:LEU:HA	1:A:117:PRO:HA	0.41	1.93	3	1
1:A:7:HIS:CE1	1:A:51:VAL:HG23	0.41	2.51	4	1
1:A:134:MET:O	1:A:138:VAL:HG22	0.41	2.15	1	1
1:A:49:THR:O	1:A:50:GLN:HB2	0.41	2.15	1	1
1:A:51:VAL:N	1:A:54:HIS:CE1	0.41	2.89	1	1
1:A:137:LEU:HD13	1:A:137:LEU:N	0.41	2.31	7	1
1:A:28:GLN:NE2	1:A:32:ASP:HB2	0.41	2.31	8	2
1:A:70:LEU:CG	1:A:71:VAL:N	0.41	2.84	8	1
1:A:7:HIS:CD2	1:A:12:ARG:O	0.41	2.74	8	1
1:A:100:VAL:CG1	1:A:140:LYS:CB	0.41	2.88	5	1
1:A:57:ILE:N	1:A:57:ILE:CD1	0.41	2.83	5	1
1:A:5:VAL:HG13	1:A:51:VAL:HG23	0.41	1.93	5	1
1:A:14:ARG:CA	1:A:15:LYS:HE3	0.41	2.46	6	1
1:A:86:ILE:N	1:A:101:PRO:CG	0.41	2.83	6	1
1:A:46:LEU:HD23	1:A:47:ALA:N	0.41	2.31	4	1
1:A:20:VAL:HB	1:A:56:ARG:HE	0.41	1.74	4	1
1:A:12:ARG:N	1:A:12:ARG:HD3	0.41	2.31	1	1
1:A:49:THR:O	1:A:50:GLN:CG	0.41	2.69	1	1
1:A:57:ILE:HD13	1:A:113:ARG:N	0.41	2.31	7	2
1:A:82:GLY:HA3	1:A:104:GLU:HB3	0.41	1.91	7	1
1:A:13:LEU:O	1:A:14:ARG:CB	0.41	2.69	9	2
1:A:20:VAL:HG12	1:A:111:LEU:HD22	0.41	1.93	9	1
1:A:140:LYS:HD2	1:A:142:PHE:CD2	0.41	2.51	2	1
1:A:93:ILE:CG1	1:A:94:PRO:HD3	0.41	2.46	8	1
1:A:24:ASN:ND2	1:A:27:ILE:HD13	0.41	2.31	4	1
1:A:34:MET:O	1:A:38:MET:CB	0.40	2.70	1	1
1:A:12:ARG:HB3	1:A:50:GLN:CA	0.40	2.47	9	1
1:A:38:MET:CG	1:A:39:TYR:CE1	0.40	3.05	9	1
1:A:132:HIS:C	1:A:134:MET:N	0.40	2.71	6	1
1:A:14:ARG:C	1:A:54:HIS:ND1	0.40	2.75	6	1
1:A:12:ARG:CA	1:A:15:LYS:HG2	0.40	2.46	1	1
1:A:50:GLN:NE2	1:A:91:LEU:HB2	0.40	2.31	1	1
1:A:46:LEU:O	1:A:133:GLU:HG2	0.40	2.17	8	1
1:A:71:VAL:HG13	1:A:72:LEU:N	0.40	2.30	8	1
1:A:100:VAL:HG13	1:A:141:LEU:HB2	0.40	1.92	6	1
1:A:90:CYS:SG	1:A:100:VAL:CG2	0.40	3.10	6	1
1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:HIS:ND1	0.40	2.31	4	1
1:A:44:ILE:CG1	1:A:45:GLY:N	0.40	2.84	4	1
1:A:103:ALA:HB3	1:A:131:GLN:NE2	0.40	2.32	1	1
1:A:18:LYS:O	1:A:19:PRO:O	0.40	2.40	1	1

Continued on next page...





Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:101:PRO:HG2	1:A:132:HIS:HD1	0.40	1.77	7	1
1:A:53:ILE:CG2	1:A:54:HIS:N	0.40	2.84	7	1
1:A:93:ILE:HB	1:A:94:PRO:CD	0.40	2.46	3	1
1:A:20:VAL:HG21	1:A:55:GLN:HG2	0.40	1.93	7	1
1:A:131:GLN:O	1:A:131:GLN:CG	0.40	2.69	7	1
1:A:100:VAL:CB	1:A:141:LEU:HB3	0.40	2.46	9	1
1:A:108:ILE:CG1	1:A:109:ARG:N	0.40	2.80	2	1
1:A:7:HIS:NE2	1:A:50:GLN:O	0.40	2.48	4	1
1:A:44:ILE:HG13	1:A:45:GLY:N	0.40	2.31	4	1
1:A:74:ASN:ND2	1:A:74:ASN:N	0.40	2.70	1	1
1:A:46:LEU:CD2	1:A:133:GLU:HG3	0.40	2.47	7	1
1:A:69:ARG:H	1:A:69:ARG:HD3	0.40	1.75	9	1
1:A:107:LYS:CG	1:A:108:ILE:N	0.40	2.84	6	1

6.3 Torsion angles

6.3.1 Protein backbone

In the following table, the Percentiles column shows the percent Ramachandran outliers of the chain as a percentile score with respect to all PDB entries followed by that with respect to all NMR entries. The Analysed column shows the number of residues for which the backbone conformation was analysed and the total number of residues.

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	131/147 (89%)	77±4 (59±3%)	36±3 (27±3%)	18±2 (14±2%)		
All	All	1179/1323 (89%)	697 (59%)	320 (27%)	162 (14%)		

All 50 unique Ramachandran outliers are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	75	PRO	9
1	A	92	SER	7
1	A	49	THR	7
1	A	142	PHE	7
1	A	91	LEU	7
1	A	50	GLN	6
1	A	57	ILE	6
1	A	13	LEU	5
1	A	140	LYS	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	17	ALA	5
1	A	56	ARG	5
1	A	14	ARG	5
1	A	19	PRO	5
1	A	93	ILE	5
1	A	38	MET	4
1	A	98	ALA	4
1	A	89	GLY	4
1	A	82	GLY	4
1	A	48	ALA	4
1	A	42	GLU	4
1	A	90	CYS	4
1	A	12	ARG	3
1	A	43	GLY	3
1	A	97	ARG	3
1	A	16	VAL	3
1	A	139	GLY	2
1	A	74	ASN	2
1	A	23	VAL	2
1	A	3	LEU	2
1	A	138	VAL	2
1	A	52	ASP	2
1	A	101	PRO	2
1	A	94	PRO	2
1	A	15	LYS	2
1	A	45	GLY	2
1	A	69	ARG	2
1	A	95	GLU	2
1	A	73	ILE	2
1	A	99	LEU	1
1	A	28	GLN	1
1	A	132	HIS	1
1	A	100	VAL	1
1	A	29	ARG	1
1	A	72	LEU	1
1	A	84	THR	1
1	A	30	ILE	1
1	A	5	VAL	1
1	A	103	ALA	1
1	A	58	ILE	1
1	A	85	GLY	1

6.3.2 Protein sidechains ⓘ

In the following table, the Percentiles column shows the percent sidechain outliers of the chain as a percentile score with respect to all PDB entries followed by that with respect to all NMR entries. The Analysed column shows the number of residues for which the sidechain conformation was analysed and the total number of residues.

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles
1	A	113/129 (88%)	88±1 (77±1%)	25±1 (23±1%)	4 31
All	All	1017/1161 (88%)	788 (77%)	229 (23%)	4 31

All 69 unique residues with a non-rotameric sidechain are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	74	ASN	9
1	A	100	VAL	8
1	A	121	GLU	8
1	A	108	ILE	8
1	A	57	ILE	7
1	A	86	ILE	7
1	A	61	ASP	7
1	A	28	GLN	6
1	A	130	ILE	6
1	A	136	HIS	6
1	A	12	ARG	6
1	A	135	ASP	6
1	A	142	PHE	6
1	A	15	LYS	6
1	A	69	ARG	6
1	A	33	ASP	5
1	A	72	LEU	5
1	A	73	ILE	5
1	A	54	HIS	4
1	A	75	PRO	4
1	A	38	MET	4
1	A	132	HIS	4
1	A	58	ILE	4
1	A	111	LEU	4
1	A	137	LEU	4
1	A	7	HIS	4
1	A	71	VAL	4
1	A	22	GLU	3
1	A	91	LEU	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	99	LEU	3
1	A	27	ILE	3
1	A	46	LEU	3
1	A	133	GLU	3
1	A	50	GLN	3
1	A	56	ARG	3
1	A	131	GLN	3
1	A	19	PRO	3
1	A	113	ARG	3
1	A	24	ASN	3
1	A	41	GLU	2
1	A	3	LEU	2
1	A	83	GLU	2
1	A	49	THR	2
1	A	126	LEU	2
1	A	77	LEU	2
1	A	104	GLU	2
1	A	97	ARG	2
1	A	32	ASP	2
1	A	93	ILE	2
1	A	140	LYS	1
1	A	88	GLU	1
1	A	92	SER	1
1	A	13	LEU	1
1	A	105	LYS	1
1	A	70	LEU	1
1	A	60	ILE	1
1	A	76	GLU	1
1	A	55	GLN	1
1	A	80	LYS	1
1	A	118	PHE	1
1	A	79	GLU	1
1	A	134	MET	1
1	A	26	GLU	1
1	A	14	ARG	1
1	A	36	GLU	1
1	A	78	LEU	1
1	A	21	GLU	1
1	A	68	GLU	1
1	A	90	CYS	1

6.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

6.4 Non-standard residues in protein, DNA, RNA chains [i](#)

There are no non-standard protein/DNA/RNA residues in this entry.

6.5 Carbohydrates [i](#)

There are no carbohydrates in this entry.

6.6 Ligand geometry [i](#)

Of 1 ligands modelled in this entry, 1 is monoatomic - leaving 0 for Mogul analysis.

6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation

No chemical shift data were provided